

令和7年度
科学研究費助成事業「学術変革領域研究（A）」
に係る事後評価報告書

「超秩序構造が創造する物性科学」

領域設定期間

令和2年度～令和6年度

令和7年6月

領域代表者 林 好一（名古屋工業大学・工学（系）研究科
（研究院）・教授）

目 次

研究組織

- 1 総括班・総括班以外の計画研究
- 2 総括班・総括班以外の計画研究の研究代表者・研究分担者
- 3 公募研究

研究領域全体に係る事項

- 4 交付決定額
- 5 研究領域の目的及び概要
- 6 研究組織の連携体制
- 7 研究目的の達成度及び主な成果
- 8 当該学問分野及び関連学問分野への貢献の状況
- 9 研究発表の状況
- 10 審査結果の所見及び中間評価結果の所見で指摘を受けた事項への対応状況
- 11 若手研究者の育成に関する取組実績
- 12 アウトリーチ活動に係る取組実績
- 13 研究費の使用状況
- 14 総括班評価者による評価

1 総括班及び総括班以外の計画研究

研究項目 [1]	課題番号 研究課題名	研究代表者氏名	所属研究機関・部局・職	人数[2]	交付決定額
					課題状況
X00 総	20H05878 超秩序構造科学のプラットフォームの構築による総括と研究支援	林 好一	名古屋工業大学・工学(系)研究科(研究院)・教授	10	225,810 (千円)
A01 計	20H05879 エマージェント物性を生みだす超秩序構造の創出	谷口 博基	名古屋大学・理学研究科・准教授	6	175,240 (千円)
A01 計	20H05880 社会実装に向けた超秩序構造物質ライブラリーに基づく合成プロセス開発	脇原 徹	東京大学・大学院工学系研究科(工学部)・教授	6	178,260 (千円)
A02 計	20H05881 先端量子ビーム手法群によるナノ・メゾスケール元素選択構造計測	小原 真司	国立研究開発法人物質・材料研究機構・マテリアル基盤研究センター・グループリーダー	7	148,840 (千円)
A02 計	20H05882 超秩序構造物質のマクロスケール物性と局所電子状態の計測	石川 毅彦	国立研究開発法人宇宙航空研究開発機構・宇宙科学研究所・教授	5	191,620 (千円)
A03 計	20H05883 大規模・高精度な第一原理計算による超秩序構造の機能解明とデザイン	中田 彩子	国立研究開発法人物質・材料研究機構・ナノアーキテククス材料研究センター・主幹研究員	3	137,760 (千円)
A03 計	20H05884 数理情報科学に基づく超秩序構造の網羅的解析	志賀 元紀	東北大学・未踏スケールデータアナリティクスセンター・教授	4	98,670 (千円)
総括班及び総括班以外の計画研究 合計 7 件(廃止を含む)					

[1] 総：総括班、計：総括班以外の計画研究

[2] 研究代表者及び研究分担者の人数(辞退又は削除した者を除く。)

2 総括班及び総括班以外の計画研究の研究代表者・研究分担者

研究項目： X00

研究課題名： 超秩序構造科学のプラットフォームの構築による総括と研究支援

代表 / 分担	研究者氏名	所属研究機関・部局・職	役割分担
代表	林 好一	名古屋工業大学・工学（系）研究科（研究院）・教授	全体総括・研究戦略策定
分担	石川 毅彦	国立研究開発法人宇宙航空研究開発機構・宇宙科学研究所・教授	共通課題設定
分担	松下 智裕	奈良先端科学技術大学院大学・先端科学技術研究科・教授	大型施設支援・事務
分担	志賀 元紀	東北大学・未踏スケールデータアナリティクスセンター・教授	HP管理・データベース
分担	中田 彩子	国立研究開発法人物質・材料研究機構・ナノアーキテクトニクス材料研究センター・主幹研究員	広報
分担	脇原 徹	東京大学・大学院工学系研究科（工学部）・教授	産業利用戦略
分担	久保園 芳博	岡山大学・異分野基礎科学研究所・教授	国際活動推進
	合計	名	

2 総括班及び総括班以外の計画研究の研究代表者・研究分担者（つづき）

代表 / 分担	研究者氏名	所属研究機関・部局・職	役割分担
分担	森川 良忠	大阪大学・大学院工学研究科・教授	若手支援
分担	谷口 博基	名古屋大学・理学研究科・准教授	海外実験支援・国際会議
分担	小原 真司	国立研究開発法人物質・材料研究機構・マテリアル基盤研究センター・グループリーダー	融合研究プランニング
	合計	10 名	

2 総括班及び総括班以外の計画研究の研究代表者・研究分担者

研究項目： A01

研究課題名： エマージェント物性を生み出す超秩序構造の創出

代表 / 分担	研究者氏名	所属研究機関・部局・職	役割分担
代表	谷口 博基	名古屋大学・理学研究科・准教授	計画研究の総括。巨大分極応答性超秩序構造および光応答性超秩序構造の設計と探索。
分担	武田 博明	埼玉大学・理工学研究科・教授	超秩序構造物質の大型高品質単結晶の育成。
分担	久保園 芳博	岡山大学・異分野基礎科学研究所・教授	新奇的な量子物性を示す超秩序構造の設計と探索。
分担	佐藤 友子	大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構・物質構造科学研究所・特別准教授	高圧下における超秩序構造物質の合成と物性評価。
分担	中島 清隆	北海道大学・触媒科学研究所・教授	革新的バイオマス変換に向けた新しい触媒活性超秩序構造の設計と探索。
分担	田中 秀明	大阪大学・蛋白質研究所・准教授	金属含有タンパク質における電子伝達性超秩序構造の機構解。
	合計	6 名	

2 総括班及び総括班以外の計画研究の研究代表者・研究分担者

研究項目： A01

研究課題名： 社会実装に向けた超秩序構造物質ライブラリーに基づく合成プロセス開発

代表 / 分担	研究者氏名	所属研究機関・部局・職	役割分担
代表	脇原 徹	東京大学・大学院工学系研究科（工学部）・教授	ゼオライトの合成と解析
分担	増野 敦信	京都大学・工学研究科・特定教授	ガラスの作製および電子状態解析
分担	北村 尚斗	東京理科大学・創域理工学部先端化学科・准教授	リチウム二次電池の作製を電気特性の評価
分担	小野 円佳	東北大学・工学研究科・教授	光ファイバー用ガラスの製作
分担	伊與木 健太	東京大学・大学院新領域創成科学研究科・講師	ゼオライトの合成と解析
分担	若林 整	東京工業大学・科学技術創成研究院・教授	半導体の微細構造解析
	合計	6 名	

2 総括班及び総括班以外の計画研究の研究代表者・研究分担者

研究項目： A02

研究課題名： 先端量子ビーム手法群によるナノ・メゾスケール元素選択構造計測

代表 / 分担	研究者氏名	所属研究機関・部局・職	役割分担
代表	小原 真司	国立研究開発法人物質・材料研究機構・マテリアル基盤研究センター・グループリーダー	本計画研究を統括するとともに試料班が合成した試料の放射光X線回折実験を担当する。また、他の計画班代表と協力して、研究計画との連携を先導する。
分担	林 好一	名古屋工業大学・工学（系）研究科（研究院）・教授	試料班が合成した試料の放射光蛍光X線ホログラフィー実験およびX線異常散乱を担当し、放射光実験用複合装置開発にも携わる。
分担	小野寺 陽平	国立研究開発法人物質・材料研究機構・マテリアル基盤研究センター・主任研究員	試料班が合成した試料のうち酸化物材料を中心に中性子回折実験を行うとともに、理論班との連携をとる。
分担	木村 耕治	名古屋工業大学・工学（系）研究科（研究院）・助教	試料班が合成した試料の蛍光X線ホログラフィーを先導し、放射光実験用複合装置開発にも携わる。また、物性班との連携をとる。
分担	田尻 寛男	公益財団法人高輝度光科学研究センター・散乱・イメージング推進室・主幹研究員	大型放射光施設SPring-8において、放射光実験用複合装置開発を主導するとともに放射光実験をサポートする。
分担	紅野 安彦	岡山大学・環境生命自然科学学域・准教授	試料班が合成した試料の放射光X線回折実験を担当し、理論班との連携をとり、ガラスの構造モデリングも行う。
分担	平田 秋彦	早稲田大学・理工学術院・教授（任期付）	試料班が合成した試料のオングストローム電子回折実験を担当する。とくに微小領域、微小試料の計測を行うとともに、理論班との連携をとる。
	合計		7 名

2 総括班及び総括班以外の計画研究の研究代表者・研究分担者

研究項目： A02

研究課題名： 超秩序構造物質のマクロスケール物性と局所電子状態の計測

代表 / 分担	研究者氏名	所属研究機関・部局・職	役割分担
代表	石川 毅彦	国立研究開発法人宇宙航空研究開発機構・宇宙科学研究所・教授	研究の取り纏め。微小重力を利用した高温酸化物融体の熱物性計測の実施。
分担	正井 博和	国立研究開発法人産業技術総合研究所・材料・化学領域・主任研究員	地上装置群を用いた酸化物ガラスの構造解析
分担	橋本 由介	奈良先端科学技術大学院大学・先端科学技術研究科・助教	硬X線光電子ホログラフィー分光装置の開発。軟X線光電子ホログラフィー分光装置を用いた実験。
分担	横谷 尚睦	岡山大学・異分野基礎科学研究所・教授	軟X線光電子ホログラフィー分光装置を用いた機能性材料の電子構造及び原子配列の計測
分担	室 隆桂之	公益財団法人高輝度光科学研究センター・分光・イメージング推進室・主幹研究員	軟X線分光装置の開発、同装置を利用した実験の実施。
	合計	5 名	

2 総括班及び総括班以外の計画研究の研究代表者・研究分担者

研究項目： A03

研究課題名： 大規模・高精度な第一原理計算による超秩序構造の機能解明とデザイン

代表 / 分担	研究者氏名	所属研究機関・部局・職	役割分担
代表	中田 彩子	国立研究開発法人物質・材料研究機構・ナノアーキテクニクス材料研究センター・主幹研究員	本計画研究の総括。大規模第一原理計算による超秩序構造物質の構造、機能の解明。
分担	鷹野 優	広島市立大学・情報科学研究科・教授	第一原理計算や分子動力学計算による、超秩序構造物質の構造、機能の解明。
分担	森川 良忠	大阪大学・大学院工学研究科・教授	第一原理計算や化学反応計算による、超秩序構造物質の構造、機能の解明。
	合計	3 名	

2 総括班及び総括班以外の計画研究の研究代表者・研究分担者

研究項目： A03

研究課題名： 数理情報科学に基づく超秩序構造の網羅的解析

代表 / 分担	研究者氏名	所属研究機関・部局・職	役割分担
代表	志賀 元紀	東北大学・未踏スケールデータアナリティクスセンター・教授	研究総括、機械学習、材料情報学
分担	松下 智裕	奈良先端科学技術大学院大学・先端科学技術研究科・教授	原子分解能ホログラフィー、原子像再生
分担	大林 一平	岡山大学・AI・数理データサイエンスセンター・教授	幾何解析、パーシステントホモロジー
分担	中島 健	島根大学・学術研究院機能強化推進学系・助教	連結パーシステントダイアグラム
	合計	4 名	

3 公募研究

研究項目 [1]	課題番号 研究課題名 研究期間	研究代表者氏名	所属研究機関・部局・職	人数[2]	交付決定額
					課題状況
A01 公	21H05550 ギガヘルツ帯電磁波が拓く固体酸触媒の動的超秩序構造 令和3年度～令和4年度	岸本 史直	東京大学・大学院工学系研究科（工学部） ・助教	1	13,000 (千円)
A01 公	21H05553 金属ホスホネートMOF類縁化合物の構造欠陥の解明と制御 令和3年度～令和4年度	前田 和之	東京農工大学・工学（系）研究科（研究院） ・准教授	1	7,800 (千円)
A01 公	21H05561 応力を用いた酸素空孔相の制御 令和3年度～令和4年度	高津 浩	京都大学・工学研究科・准教授	1	3,900 (千円)
A01 公	21H05563 ねじれX字型分子が作る結晶内一次元チャンネルにおける超秩序構造の化学 令和3年度～令和4年度	焼山 佑美	大阪大学・大学院工学研究科・准教授	1	3,900 (千円)
A01 公	21H05564 非晶質絶縁膜/ダイヤモンド単結晶界面極薄領域の超秩序構造 令和3年度～令和4年度	藤井 菜美	近畿大学・理工学部・准教授	1	7,800 (千円)
A01 公	21H05566 Bi系 - 族半導体混晶の機能発現機構の解明に向けた秩序構造の可視化と制御 令和3年度～令和4年度	富永 依里子	広島大学・先進理工系科学研究科（先） ・准教授	1	7,800 (千円)
A01 公	21H05567 Fe-Fe原子相関を超秩序構造とした不規則鉄合金の構造可視化 令和3年度～令和4年度	石松 直樹	広島大学・先進理工系科学研究科（理） ・特定准教授	1	7,800 (千円)
公募研究 合計					件（廃止を含む）

[1] 公：公募研究

[2] 公募研究は研究代表者が1名で実施

3 公募研究(つづき)

研究項目 [1]	課題番号 研究課題名 研究期間	研究代表者氏名	所属研究機関・部局・職	人数[2]	交付決定額
					課題状況
A01 公	21H05568 層状ペロブスカイトの層間侵入アニオンが形成する超秩序構造の解明と電氣的秩序の制御 令和3年度～令和4年度	赤松 寛文	九州大学・工学研究院・准教授	1	7,800 (千円)
A01 公	21H05569 放射光を用いた機能性ゼオライトの原子配列・電子構造そしてダイナミクスの研究 令和3年度～令和4年度	細川 伸也	熊本大学・産業ナノマテリアル研究所・特任教授	1	7,800 (千円)
A01 公	21H05572 強誘電性半導体におけるドーパント誘起超秩序構造の外場印加下の機能解明 令和3年度～令和4年度	中嶋 誠二	兵庫県立大学・工学研究科・准教授	1	7,800 (千円)
A01 公	21H05573 単一の原子数と組成に秩序化された合金担持触媒の構造活性評価 令和3年度～令和4年度	中嶋 敦	慶應義塾大学・理工学部(矢上)・教授	1	7,800 (千円)
A01 公	23H04097 動的超秩序構造に立脚した『マイクロ波触媒作用』の学理開拓 令和5年度～令和6年度	岸本 史直	東京大学・大学院工学系研究科(工学部)・講師	1	11,310 (千円)
A01 公	23H04098 軽元素添加によって実現する界面超伝導の転移温度高温化 令和5年度～令和6年度	秋山 了太	東京大学・大学院理学系研究科(理学部)・助教	1	3,250 (千円)
A01 公	23H04099 機能性酸化物薄膜における傾斜格子ひずみ誘起超秩序構造とスピン・双極子物性 令和5年度～令和6年度	田畑 仁	東京大学・大学院工学系研究科(工学部)・教授	1	13,300 (千円)
公募研究 合計					件(廃止を含む)

[1] 公：公募研究

[2] 公募研究は研究代表者が1名で実施

3 公募研究(つづき)

研究項目 [1]	課題番号 研究課題名 研究期間	研究代表者氏名	所属研究機関・部局・職	人数[2]	交付決定額
					課題状況
A01 公	23H04110 酸化物中の水素超秩序構造の観測と水素機能の開拓 令和5年度～令和6年度	菅 大介	京都大学・化学研究所・准教授	1	11,050 (千円)
A01 公	23H04112 バタフライ型分子からなる一次元チャンネル含有結晶が作る超秩序構造の化学 令和5年度～令和6年度	焼山 佑美	大阪大学・大学院工学研究科・准教授	1	6,500 (千円)
A01 公	23H04113 非晶質領域の局所構造計測に基づくMOS界面制御 令和5年度～令和6年度	上沼 睦典	国立研究開発法人産業技術総合研究所・エレクトロニクス・製造領域・主任研究員	1	3,250 (千円)
A01 公	23H04116 バルク金属の多段階精密酸化プロセスによる酸素欠損型超秩序構造の創製と機能特性評価 令和5年度～令和6年度	松田 光弘	熊本大学・大学院先端科学研究部(工)・准教授	1	6,500 (千円)
A01 公	23H04117 放射光を用いた機能性ゼオライトの原子配列・電子構造そしてダイナミクス の研究 令和5年度～令和6年度	細川 伸也	島根大学・材料エネルギー学部・研究員	1	6,500 (千円)
A01 公	23H04119 Bi系リラクサーの誘電応答を支配する超秩序構造の理解と制御 令和5年度～令和6年度	萩原 学	慶應義塾大学・理工学部(矢上)・准教授	1	6,500 (千円)
A01 公	23H04124 ウルツ鉱型強誘電体の抗電界低減を可能とする置換カチオン探索 令和5年度～令和6年度	清水 荘雄	国立研究開発法人物質・材料研究機構・電子・光機能材料研究センター・主任研究員	1	6,500 (千円)
公募研究 合計 件(廃止を含む)					

[1] 公：公募研究

[2] 公募研究は研究代表者が1名で実施

3 公募研究(つづき)

研究項目 [1]	課題番号 研究課題名 研究期間	研究代表者氏名	所属研究機関・部局・職	人数[2]	交付決定額
					課題状況
A01 公	23H04125 磁場によって誘導される蛋白質超秩序構造化の機構解明 令和5年度～令和6年度	新井 栄揮	国立研究開発法人量子科学技術研究開発機構・量子生命科学研究所・上席研究員	1	11,050 (千円)
A02 公	21H05546 環状ネットワーク侵入型発光中心と原子空孔のマルチプローブ分光 令和3年度～令和4年度	北浦 守	山形大学・理学部・教授	1	7,800 (千円)
A02 公	21H05547 中性子ホログラフィーの高分解能化による超秩序構造中の軽元素挙動の観測 令和3年度～令和4年度	大山 研司	茨城大学・理工学研究科(工学野)・教授	1	7,800 (千円)
A02 公	21H05549 超秩序構造が発現する原子ダイナミクスの解析 令和3年度～令和4年度	大窪 貴洋	千葉大学・大学院工学研究院・准教授	1	12,740 (千円)
A02 公	21H05551 電子顕微鏡直接観察に基づくMg合金中の溶質原子クラスター解析 令和3年度～令和4年度	江草 大佑	東京大学・大学院工学系研究科(工学部)・助教	1	7,540 (千円)
A02 公	21H05574 高分子のホストゲスト共結晶構造・共アモルファス構造の探索 令和3年度～令和4年度	千葉 文野	慶應義塾大学・理工学部(矢上)・講師	1	7,800 (千円)
A02 公	23H04094 電子・陽電子プローブによって解き明かす酸化クロム膜における超秩序構造の階層性 令和5年度～令和6年度	北浦 守	山形大学・理学部・教授	1	6,500 (千円)
公募研究 合計					件(廃止を含む)

[1] 公：公募研究

[2] 公募研究は研究代表者が1名で実施

3 公募研究(つづき)

研究項目 [1]	課題番号 研究課題名 研究期間	研究代表者氏名	所属研究機関・部局・職	人数[2]	交付決定額
					課題状況
A02 公	23H04095 白色中性子ホログラフィーでの高分解能多検出器系の実装による軽元素超秩序構造の観測 令和5年度～令和6年度	大山 研司	茨城大学・応用理工学野・教授	1	6,370 (千円)
A02 公	23H04096 機械学習によるNMRパラメータの解釈と原子構造推定データフローの構築 令和5年度～令和6年度	大窪 貴洋	千葉大学・大学院工学研究院・准教授	1	10,920 (千円)
A02 公	23H04104 超秩序構造に対するナノビームX線を用いた時間分解回折構造研究 令和5年度～令和6年度	片山 尚幸	名古屋大学・工学研究科・准教授	1	6,500 (千円)
A02 公	23H04118 ペロブスカイト型強誘電体における欠陥双極子の制御と超秩序構造設計 令和5年度～令和6年度	松尾 拓紀	熊本大学・大学院先端科学研究部(工)・特定事業教員(准教授)	1	11,050 (千円)
A02 公	23H04122 CoDELMMAの開発と原子ホログラフィー顕微鏡 令和5年度～令和6年度	大門 寛	分子科学研究所・極端紫外光研究施設・研究員	1	5,460 (千円)
A03 公	21H05544 大規模量子化学計算と結晶構造DBを用いた超秩序構造のシナジー効果・動的特性の解明 令和3年度～令和4年度	小林 正人	北海道大学・理学研究院・准教授	1	7,800 (千円)
A03 公	21H05552 機械学習原子間ポテンシャルを用いた次世代電子素子中の超秩序構造の解析 令和3年度～令和4年度	渡邊 聡	東京大学・大学院工学系研究科(工学部)・教授	1	7,800 (千円)
公募研究 合計					件(廃止を含む)

[1] 公：公募研究

[2] 公募研究は研究代表者が1名で実施

3 公募研究(つづき)

研究項目 [1]	課題番号 研究課題名 研究期間	研究代表者氏名	所属研究機関・部局・職	人数[2]	交付決定額
					課題状況
A03 公	21H05560 局所構造記述子を用いた複合欠陥含有誘電体材料の解析と設計手法の探索 令和3年度～令和4年度	旭 良司	名古屋大学・未来社会創造機構・教授	1	13,000 (千円)
A03 公	23H04093 大規模量子分子動力学計算と準安定結晶構造探索に基づく超秩序構造の理論的研究 令和5年度～令和6年度	小林 正人	北海道大学・理学研究院・准教授	1	6,500 (千円)
A03 公	23H04100 次世代電子素子中の超秩序構造の機械学習ポテンシャルによる解析法の高度化とその応用 令和5年度～令和6年度	渡邊 聡	東京大学・大学院工学系研究科(工学部)・教授	1	6,760 (千円)
A03 公	23H04105 同時ドーピングされた金属酸化物材料の巨大誘電率発現機構の解明と材料設計 令和5年度～令和6年度	旭 良司	名古屋大学・未来社会創造機構・教授	1	11,050 (千円)
公募研究 合計 39 件(廃止を含む)					

[1] 公：公募研究

[2] 公募研究は研究代表者が1名で実施

研究領域全体に係る事項**4 交付決定額**

年度	合計	直接経費	間接経費
令和2年度	322,400,000円	248,000,000円	74,400,000円
令和3年度	289,800,000円	224,250,000円	65,550,000円
令和4年度	294,580,000円	226,600,000円	67,980,000円
令和5年度	289,110,000円	222,420,000円	66,690,000円
令和6年度	272,610,000円	210,270,000円	62,340,000円
合計	1,468,500,000円	1,131,540,000円	336,960,000円

5 研究領域の目的及び概要

研究領域全体を通じ、本研究領域の研究目的及び全体構想について、応募時の領域計画書を基に、具体的かつ簡潔に記述すること(2頁以内)。なお、記述に当たっては、どのような点が「これまでの学術の体系や方向を大きく変革・転換させる」もの(例えば、「新しい原理や学理の発見・追究をするもの」、「学術の概念や体系の見直しを迫るもの」、「大きな発想の転換や斬新な方法論によりブレークスルーをもたらすもの」)であるか、研究の学術的背景や領域設定期間終了後に期待される成果等を明確にすること。

「超秩序構造科学」がもたらす学術的変革

科学技術立国を目指す日本において、材料科学は国内屈指の得意分野の一つであり、世界の科学界を牽引してきた。しかしながら、近年、アジア諸国の台頭によって、その存在感は急速に失われつつある。このような状況を脱却するためには、現在でも世界最高水準レベルである分析・解析技術に立脚し、未開拓であった材料科学分野への挑戦が必須である。我々が解明する「超秩序構造」とは、完全規則性、完全無秩序からの構造的な“ずれ”である。例えば、結晶中の欠陥やガラスネットワーク構造における結晶的トポロジを指す。本領域では、ドーパントや空孔・空隙、またはこれらの組み合わせによって形成される「超秩序構造」を中心に研究を推進する。「超秩序構造」は材料機能性の宝庫であり、高度に構造を制御することにより無限の可能性を創出できる。我々は、「超秩序構造」を正確に決定できる計測、深く理解するための理論、構造制御のための合成プロセスを融合した学術変革領域「**超秩序構造が創造する物性科学**」を立ち上げ、材料開発に新たなブレークスルーをもたらし、日本科学のプレゼンスを強化する。

背景及び全体構想

領域代表者らは、**原子分解能ホログラフィー**と呼ばれる世界トップの手法を駆使し、新学術領域「**3D活性サイト科学**」を立ち上げ、ドーパント構造の3次元的解明に取り組んできた。3D観測された活性サイトは、少なからず、研究開始当初に想定された構造より複雑さに富んでおり、ナノレベルの特異的な構造を形成していることが改めて浮き彫りになった。一方で非晶質分野ではトポロジカル解析が導入されたこともあり、一見、ランダムに見える原子配列の中の結晶的秩序が可視化された。この二つの研究対象は、お互い独立しているように見えるが根底の部分で繋がっており、同じ土俵で議論することによって相乗効果が狙える。「超秩序構造科学」以前の物性科学は、「完全秩序を持つ結晶」と「完全無秩序なアモルファス」として、ほぼ独立に実施されており、「完全秩序」と「完全無秩序」との間に存在する中間的な構造の領域は、学問的にほぼ未開拓であった。我々が取り組むのは、この領域に存在する特異構造の制御であり、結晶やアモルファスに高機能性を付与する重要な鍵因子であると考えている。この特異的な秩序構造を我々は「**超秩序構造**」と呼んでいる。

図1(a)–(c)は我々が決定した「超秩序構造」の例である。(a),(b)は、それぞれ、ガラス及び結晶の中の複合欠陥である。(a)は、異種アルカリ金属を添加させることによりガラスの低融点化と耐食性向上を引き起こす混合アルカリ効果についてであり、その効果の起源となる異種アルカリ原子対である。(b)はシリコンにヒ素を高ドーパさせた際に形成される不活性なヒ素クラスターである。中心の空孔にホウ素を導入することにより活性化させることが可能であり、領域内研究において、その創製と観測に成功した。(c)は、アモルファス物質中の結晶トポロジの例であり、例に示しているゼオライトは結晶化寸前に空隙を転写したような結晶トポロジが出現する。領域内研究では、時分割測定で詳細な相変化観測に取り組んできた。このようなナノスケール秩序を基盤に、本研究領域の重点研究対象を、A「**ドーパント誘起超秩序構造**」、B「**空孔・空隙を含む超秩序構造**」、C「**結晶/アモルファス境界の超秩序構造**」と設定しプロジェクトを推進する。

当該研究領域は、「超秩序構造」を正確に決定できる**原子分解能ホログラフィー**、**X線異常散乱**、**オンゲストローム電子回折**など世界屈指の計測技術を有していることを強みとしている。関連してX線・中性子散乱データからガラス構造のモデリングを行う**逆モンテカルロ法**にも精通しており、得られた正確な原子配列から、数学的解析法である**パーシステントホモロジー**などのトポロジ解析を用いて規則性の抽出に取り組む。本領域が対象とする複合欠陥やガラスネットワーク構造のナノスケール秩序の電子状態を理論的に取り扱うために、大量原子を取り扱えるオーダーN法第一原理計算プログラムCONQUESTなどの**大規模第一原理計算**を活用する。これらの手法を用いて取り扱う材料は、誘電体、光学材料、触媒、超伝導体、そして、タンパク質と幅広い。上記手法で得られた構造情報と試料の物性情報をライブラリー(データベース)化し、これらの情報を基に機械学習を援用して「超秩序構造」を基盤とした材料設計を行い、新規材料の合成を実践する。

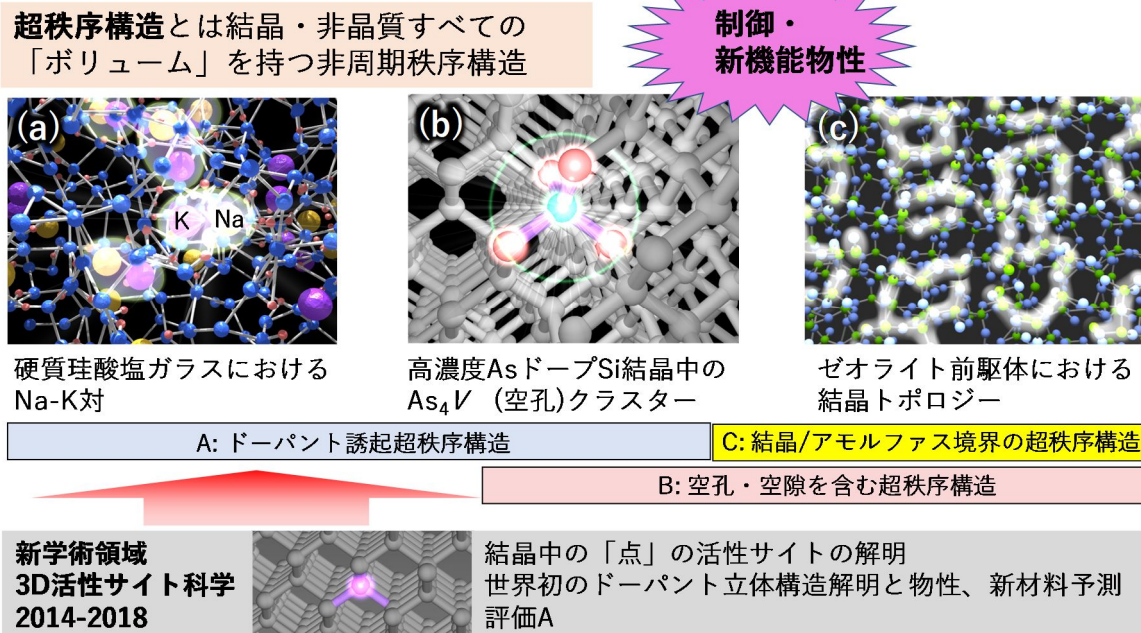


図 1 様々な材料における「超秩序構造」. (a): Na-K 対はイオン伝導を抑えガラスの化学耐久性を飛躍的に向上させる. (b): As₄V クラスターはAsを高濃度にSiにドープした際に生じる. V(空孔)にBを導入できれば固溶限界を超えてドナー活性率を向上できる. (c): ゼオライトに高压処理を施すことにより得られる相であり、空隙は結晶化時に転写されゼオライト空孔を形成する. A、B、Cは本領域で取り扱う重点研究対象である.

上記目標を達成する組織として、総括班(X00)を中心に A01 試料班、A02 手法班、A03 理論班と3つの班が配置され、さらに、2年度目以降は研究対象拡大を担う公募班も参画する。総括班は、それぞれの班のパフォーマンスの最大限化と、班間の密接連携を促進するための活動を進め、学理創成・国際展開・産業利用といった最終目標に向かって領域を運営していく。

領域設定期間終了後に期待される成果

本領域が行うのは、これまでに接点の少なかった結晶と非晶質のコミュニティーの統合であり、そのシナジー効果に基づく学術体系の変革である。結晶と非晶質を同じ土俵で議論するためのトポロジー解析を基盤に、今後の物性・材料科学の理解に重要な Order/Disorder の不変量を決定できる。また、これまでに結晶にしか適用されなかった原子分解能ホログラフィーを結晶/アモルファス界面構造に適用したり、ガラスに結晶トポロジーを導入するなど、技術交流による新たな分野開拓に繋がる画期的な研究推進が期待される。ダイナミクス計測における結晶と非晶質の境界領域についても J-PARC の長期利用により議論を進めており、一定の成果が見受けられる。以下に申請時に記載し、現在も鋭意取り組んでいる達成目標を示す。

- 「超秩序構造物性科学の学理構築」:
- ⑦ 「超秩序構造」の幾何学的指標を用いた体系化を行う。具体的には、結晶対称性を表す点群に代わるものを考案する。「超秩序構造」の概念を浸透させるために必須の達成目標である。
 - ⑧ 「超秩序構造科学」をコンセプトにした日本語・英語版の教科書の執筆を行う。
- 「国際化と日本科学のプレゼンス強化」:
- ⑨ 30%以上を国際共同研究の成果(国際共著論文)とする。我々の特筆すべき成果を海外の高名な研究者を通じて評価してもらうことは、我々の活動の国際的評価の向上に繋がる。
 - ⑩ 海外施設における本領域手法装置の常設化と定量的な物理量を求めるための手順を示す国際標準化を進める。
- 「日本産業への貢献」:
- 従来にない新規機能を創出できる「超秩序構造」のデザインと、それに基づく新規材料の合成及びデバイス開発を行う。具体的な出口目標として、⑪ CO₂ 大幅削減を目指した900 耐熱超安定ゼオライト deNO_x触媒、⑫ 100 cm²/V・s 移動度の低コスト薄膜トランジスタ、⑬ 強度二倍の割れないスマートフォン用カバーガラス、⑭ 比誘電率 10⁵ 級高温高信頼性キャパシタの開発と定める。

6 研究組織の連携体制

研究領域全体を通じ、本研究領域内の研究項目間、計画研究及び公募研究間の連携体制について、図表などを用いて具体的かつ簡潔に記述すること(1頁以内)

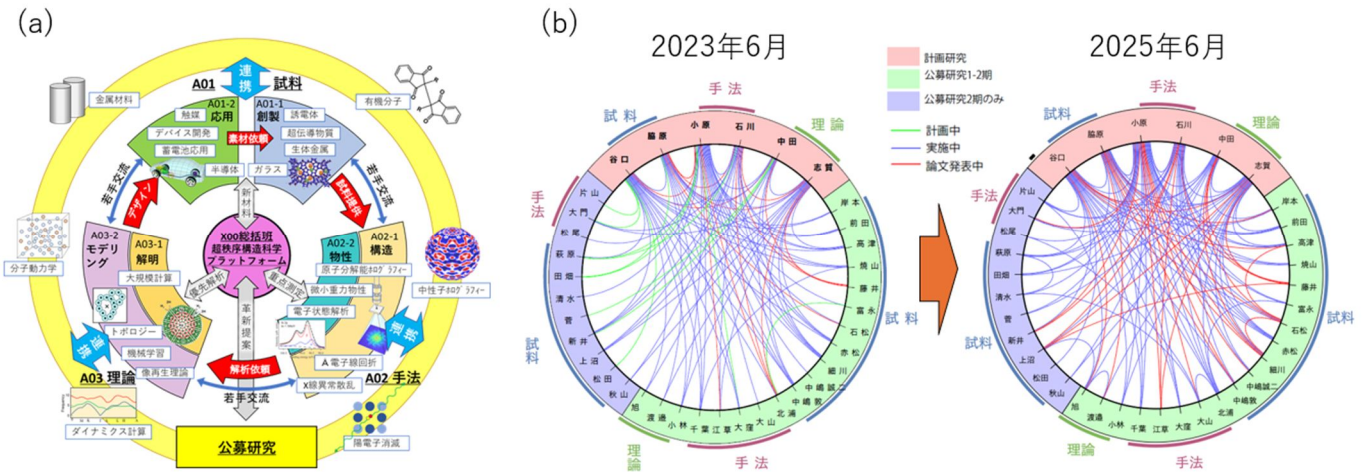


図 2 (a)本研究領域の組織と連携体制，及び(b)各々のグループと連携ネットワークの変化

本研究領域は、図 2(a)に示すように、総括班を中心に A01 試料班、A02 手法班、A03 理論班と 3 つの班が配置されている。総括班(X00)が、三つの研究項目を A01 A02 A03 A01 のように駆動させ、領域全体を学理創成・国際展開・産業利用といった目標に向かって加速させている。班内ではより密接な連携を常に行い、強固な班間連携へと反映させる。公募研究班は、計画研究班では不足部分の補完と革新技術導入による相乗効果を狙う役割がある。総括班では、連携研究の進捗状況を定期的にチェックしており、その統計に基づく、中間評価時(2023 年 6 月)と最終報告時(2025 年 6 月)の連携ネットワークを図 2(b)に示す。非常に多くの連携(153 組)が、領域代表のリーダーシップの下に実践されていることが分かる。最終的に、計画研究間の連携は 70 組、計画研究 公募研究間では 94 組、公募研究間では 13 組となった。これらの連携の中で、67 組の連携が論文発表にまで達している。中間評価時には、その数が 37 組であったことを考えれば、この 2 年間で連携の成果が各段に伸びたことが分かる。

領域後半期の主要な連携研究について 3 項目記述する。これらはいずれも、試料、手法、理論の全ての班の多くのメンバーが関与している。

複合欠陥探索と機能性材料創製に向けた設計

点欠陥を超えた機能創製を複合欠陥によって達成することを目指した連携である。試料班により合成された酸化物材料の単結晶やガラスを対象試料として、複数の異種元素を添加した場合の物性の変化を調査する。局所領域観測に適した原子分解能ホログラフィーや X 線吸収微細構造法、電子顕微鏡を駆使して複合欠陥の詳細を決定する。また、第一原理計算や機械学習を駆使し、複合欠陥の役割を解明し、さらに最適な組み合わせを予測する。

トポロジカル解析を基盤とした Order/Disorder 不変量の決定

結晶、非晶質に関わらず X 線・中性子回折によって得られたデータから逆モンテカルロ法によって原子配列を決定し、パーステントホモロジーなどのトポロジカル解析を適用することによって、Order/Disorder の不変量を導き出す。単純に、完全結晶 完全ランダムの場合の度合いを表現する不変量を決定するだけでなく、既存結晶とガラスの類似性を同じ土俵で議論するための指標化にも取り組む。なお、圧力などの外場による不変量変化から材料の物性や機能性との相関性に関する議論も進める。

「超秩序構造」のダイナミクス

X 線や中性子非弾性散乱を用いたダイナミクス計測を目的とした連携であるが、多様な試料の計測を行い理論的な解明にも取り組む。低エネルギー励起振動であるボゾンピークの分散関係の観測、試料の高密度化に伴うトポロジーとダイナミクスの変化についての議論を行う。また、欠陥によって誘起される新たな振動モードやフォノンバンドンのソフト化についても精緻な計測を試み、そのデータに対し、ハイブリッド汎関数を適用した検証や、誘電率や熱電率などの物性との相関についても議論する。

7 研究目的の達成度及び主な成果

本研究領域の研究目的の達成度及び主な成果について、以下のとおり記述すること。

1. 研究領域全体の達成度及び成果の概要

以下の点について具体的かつ簡潔に記述すること(2頁以内)

- (1) 領域設定期間内に何をどこまで明らかにしようとし、どの程度達成できたか
- (2) 研究を推進するに当たって特に留意した点、生じた問題又は課題への対応状況等

研究推進の過程において当初に想定・予見していなかった新たな展開(計画、研究手法、アプローチ方法の見直し又はセレンディピティ等)によって得られた研究成果がある場合には、その成果の内容とともに、当該成果が得られた経緯を当初計画との関係性を含めて説明すること

2. 計画研究及び公募研究の達成度及び成果

研究項目(計画研究及びそれと連携している公募研究)ごとに、以下の点について具体的かつ簡潔に記述すること(一つの計画研究及び連携する公募研究で2頁以内)。記述に当たっては、「9 研究発表の状況」に記載の研究成果との対応関係がわかるように記載すること。

- (1) 領域設定期間内に何をどこまで明らかにしようとし、どの程度達成できたか
- (2) 各計画研究で得られた成果、及びそれぞれの計画研究と連携している公募研究で得られた成果(計画研究・連携する公募研究の順で記載すること。なお、本研究領域内の共同研究等による成果の場合はその旨を明確にすること。)

研究推進の過程において当初に想定・予見していなかった新たな展開(計画、研究手法、アプローチ方法の見直し又はセレンディピティ等)によって得られた研究成果がある場合には、その成果の内容とともに、当該成果が得られた経緯を当初計画との関係性を含めて説明すること

(1. 研究領域全体の達成度及び成果の概要)

(1) 領域設定期間内に何をどこまで明らかにしようとし、どの程度達成できたか

(1-1) 領域運営の柱となる3つの主要目標の達成度

【計測根拠学理の確立と産学界への貢献】「超秩序構造」を決定できる複数の装置を建設し、量子ビーム施設の特定期間内に設置した。トポロジー解析を基盤とした Order/Disorder の定量的指標を決定した。得られた多くの構造・物性データを、領域で構築した「ライブラリー」に格納し、蓄電池などの性能向上に繋げるための取り組みに利用している。領域コンセプトに近い「ゆらぎ材料」(CREST, さきがけ)が令和7年度より立ち上がっており、日本学術界への影響はある程度与えたと考えている。

【世界拠点の形成と日本のプレゼンス向上】英語の専門書を Springer より発刊した。また、合計5回の国際シンポジウム・ワークショップを海外で開催することにより、領域アクティビティを効果的に海外に公開できたと考えている。また、フランス・グルノーブルの材料科学研究所(SIMaP)にポスドクを置き拠点を構え、国際共同研究や会議企画の足掛かりとした。国際共著は全体の27.5%であり、当初の目標(30%)をやや下回ったが、コロナ禍で海外との交流が不十分であることが影響した。

【若手人材の育成】期間中に合計21名のメンバーの昇進があった。特に計画班代表者は、既に教授等であったものを除き全員昇進した。また、14名の若手海外派遣を行い、フォレスト賞(領域で企画した若手向けの賞)受賞者には上記領域国際シンポジウム・ワークショップにおいて招待し、口頭発表の機会を与えた。毎年春に「若手の学校」を行い、領域が取り扱う構造解析・大規模第一原理計算・トポロジー解析などの講習会を行った。2023,24年度は対面開催とし、より効果的に実施できた。

(1-2) 重点融合研究項目 ~ の達成度 (' は期間途中で新たに掲げた項目)

新「超秩序構造」設計・創製: TiO₂に様々な点欠陥や複合欠陥を導入したモデルを構築し、第一原理計算や機械学習を駆使し、高い誘電率を創出する欠陥構造をデザインした。[88]ゼオライト合成に関する研究では、小細孔ゼオライトの骨格を崩さずにAlを除去する合成法を開発し、耐久性を高めることに成功した。[8,15]また、細孔内の孤立イオンをマイクロ波で選択加熱することにより、触媒反応を格段に向上させた。[85]ガラス材料の高温・高圧印加によるトポロジー制御に関する研究では、SiO₂ガラスにおいては透過性向上[2]、Al₂O₃ガラスにおいては結晶/ガラスの中間構造とも言える5配位構造の創製に成功し、これが誘電率増強に繋がった。これらの成果は海底光ファイバー、MOS-FETのゲート絶縁膜への応用が見込まれる。

対象材料・物質拡大化:「蛍光X線ホログラフィー/X線異常散乱複合計測装置」を完成させ、多くのユーザーの利用に供した。[22]合計37の課題(135日)を実施し、様々な試料を計測することができた。測定範囲拡大については、濃度・圧力・試料サイズの観点から取り組みを進めた。希薄試料については1.3×10⁻⁴%のドーパント(As:CdTe) [33]、圧力については13.3 GPaの高圧下(SrTiO₃)におけるホログラム計測に成功しており、当初目標を高いレベルで達成できた。微小試料計測については、20µmサ

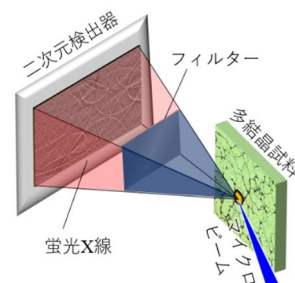


図3 結晶粒のホログラム測定

イズのセラミックス結晶粒のホログラム計測(図3) [23]、オングストロームビーム電子回折法による 1nm 領域のシリカガラスの超秩序構造抽出に成功している。[28]

計測・解析プラットフォーム創設： X線回折からの原子構造可視化、化学結合に関する統計処理、トポロジー解析などを簡便に行える GUI ソフトウェア(SOVA: Structural Order Visualization and Analysis)を開発し公開も行っている。[46] Order/Disorder の学理構築において本ソフトウェアが威力を発揮した。多くのユーザーが既に利用している原子分解能ホログラフィー統合解析ソフト 3D_AIR_IMAGE[47]については、微小試料、タンパク質計測で必要となるノーマルモードの解析機能を強化した。ハード面では、バルク構造と電子状態を同時計測できる「硬 X線光電子ホログラフィー」装置の建設を完了させた。計測された様々なデータはライブラリー(図4)に保存してあり(登録数は 230 超)、今後も引き続き登録する。これらのデータは永続的に公開することを目的に物質・材料研究機構のサーバーに移行しつつある。

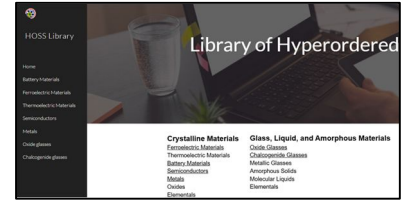


図4 ライブラリー-HP

「超秩序構造科学」学理構築： 期間後半に、「超秩序構造」のトポロジー記述について集中的に議論し、その体系化を試みた。分子動力学(MD)計算による結晶から融体までの構造変化から、リングサイズ分布の切り替わりを見出し、結晶・非晶質の境界を示す指標を得た(図5)。このことから、リングのサイズさらには形状を記述子として結晶から非晶質までを統一的に分類・体系化する着想を得た。これについては、「中間評価結果の所見への対応」にて詳述する。本領域では、合計4つの特集号を発刊し、研究活動において得られた知見や論考をタイムリーに公開してきた。2023年度には、Springer から英文専門書”Hyperordered Structures in Materials”を発刊し、我々のアクティビティーを海外に効果的に発信できたと考えている。

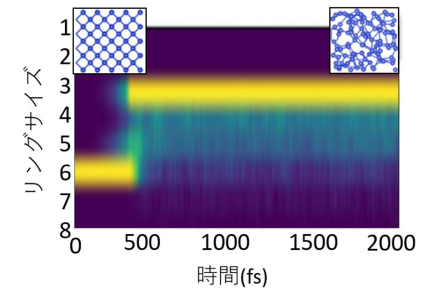


図5 MD 計算で得られた Si の融解に伴うリングサイズ分布変化

「超秩序構造」の構造・ダイナミクス： 構造のみでなくダイナミクスの視点から「超秩序構造」を理解する課題を追加した。ガラスや乱れた結晶の低エネルギー振動(ボゾンピーク)や中性子散乱を観測することを目的として、J-PARC の長期利用課題を獲得した(2022~25)。現時点で全ビームタイムは完了していないが、いくつかの興味深いデータは得られている。また、TiO₂に1%程度 Nb を添加することにより誘電率が増強されることを実験的に見出し[11]、これが Nb 周辺のポーラロンに基づくことを解明した。この試料に対しては、10 K における X線非弾性散乱の実験からフォノンのサブバンドの出現も観測された。また、ガラスの弾性不均一性とボゾンピークとの関係についても考察が進んだ。[24]

(1-3) 想定・予見していなかった新たな展開

個別には多くの事例があり、詳細は次ページ以降に記載してあるが、領域全体として特筆すべきことは、「結晶」と「アモルファス」コミュニティの融合が、当初の想定をはるかに超えて進行したことにある。ここでは、トポロジカル解析が共通言語となり同じ土俵での議論が可能となった。結果、結晶/アモルファス中間相の理解が大きく深まり、見い出された「構造ゆらぎ」に基づく機能発現の探究が、材料科学の次の潮流に繋がったと考えている。また、「超秩序構造」のダイナミクスの研究からは、僅かな添加元素により物質のフォノンバンドが変調することが見いだされた。[26,27]フォノン構造を自在に制御できれば、それを活用した新しい材料創製にも繋がり、理解するための次の学理の創設にも道が開ける。

(2) 研究を推進するに当たって特に留意した点、生じた問題又は課題への対応状況等

領域開始直後から COVID-19 パンデミックが始まり、対面会議や海外渡航の大きな制限があり、連携を組むべき最初の段階で大きな障害があった。オンラインによる議論も当然併用したが、温度感の伝わる対面での議論は必要であると感じ、最大限、会合やミーティングは対面もしくはハイブリッド方式で行った。その意図はメンバーにも十分伝わり、比較的スムーズに良い連携を組むことができたと考えている。もう一つの問題は、2022年に始まったウクライナ戦争であり、電気代高騰による大型量子ビーム施設のビームタイムの減少、特に J-PARC は線源の不具合も重なり、その影響が甚大であった。そのため、J-PARC における長期利用課題は完了していないが、本プロジェクト終了後も実験と解析は続け、提案している学理の精度を上げるための努力は継続する。

(2. 計画研究及び公募研究の達成度及び成果)

【研究項目 A01-1 「エマージェント物性を生み出す超秩序構造の創出」】

(1) 領域設定期間内に何をどこまで明らかにしようとし、どの程度達成できたか

【計画:課題1】「超秩序構造」による誘電体マルチチューナビリティの創出

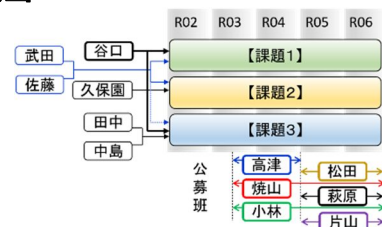
網羅的機能探索と精密物性計測により特異的な誘電・分極・圧電・光応答物性を見出し、超秩序構造との相関を解明する。

【計画:課題2】「超秩序構造」による超伝導未来エネルギー材料の創製

超秩序構造による新奇超伝導物質および電子材料の開発と広い温度・圧力領域での基礎物性計測を実施し、超秩序構造 - 電子物性相関を解明する。

【計画:課題3】「超秩序構造」による高活性電子伝達複合体の創製

光反応活性超秩序構造における電子伝達メカニズムを理解し、材料探索・精密構造解析・反応開拓技術の融合により革新的な触媒反応システムを創出する。



【公募:松田】バルク金属の多段階精密酸化プロセスによる酸素欠損型超秩序構造の創製と機能特性評価
酸素欠損を高濃度かつ周期的に導入することで、「酸素欠損型 - 超秩序構造」の創製に挑戦し、特に非磁性元素による強磁性の発現とその機構解明を目指す。(片山 G(公募)とも連携)

【公募:萩原】Bi 系リラクサーの誘電応答を支配する超秩序構造の理解と制御

Bi 系リラクサーなどにおけるイオン変位による複雑な分極構造と誘電特性との関係を理解し、大容量セラミックキャパシタの創製につなげる。(A01 脇原 G、A02 小原 G とも連携)

【公募:片山】超秩序構造に対するナノビーム X 線を用いた時間分解回折構造研究

LiVS₂、TaTe₂、Bi₂Rh₃Se₂ などにおける電子系の自発的な低対称化が格子と絡み合っ生じる特徴的な局所構造を対象として、複数の放射光技術を組み合わせた構造解明を実施する。(A02 小原 G とも連携)

【公募:小林】大規模量子分子動力学計算と準安定結晶構造探索に基づく超秩序構造の理論的研究

「シナジー効果」と「動的特性」の 2 点に焦点を当て、超秩序構造材料の機能発現機構を原子レベルで解明するための計算化学プラットフォームを構築し、領域内の融合研究を展開する。

【公募:焼山】バタフライ型分子からなる一次元チャンネル含有結晶が作る超秩序構造の化学

バタフライ型分子と曲面 共役分子を対象として、劇的な構造変化が可能な柔軟な結晶内部で分子形状を制御することによって、様々な機能性を創出する。(A01 脇原 G、A02 小原 G とも連携)

【公募:高津】応力を用いた酸素空孔相の制御

応力下低温トポケミカル反応を使って酸素空孔やアニオン配列を能動的に制御し、新しい次元性、対称性、組成の新規物質創製により、新たな機能性を開拓する。(A02 小原 G とも連携)

【計画:課題1】Nb⁵⁺とGa³⁺を添加したTiO₂においてNb⁵⁺は誘電率増強、Ga³⁺は絶縁性に寄与していることを明らかにした。また、チタン石型酸化物において新奇誘電率増強効果を発見した。[5,11]

【計画:課題2】元素添加したFeSeの超伝導転移温度(T_c)を広い圧力範囲に渡って決定しT_cと格子定数の間に明瞭な相関があることを見出した。また、K_{0.7}Ca_{0.3}C₈超伝導体の超秩序構造を解明した。[4,9]

【計画:課題3】金ナノ粒子を固定した超秩序構造体の触媒作用と副反応抑制により、PET原料の合成について従来よりも10~20倍生産性を向上させつつ環境負荷を低減することに成功した。[12]○

【公募:松田】周期的配列を有する酸素欠損型 - 超秩序構造ZrO_{2-x}薄膜の創製に成功し室温強磁性を示すことを発見した。現在、手法班と連携してこの機構解明に取り組んでいる。[73]○

【公募:萩原】TiO₂にNb⁵⁺とAl³⁺を共添加すると絶縁破壊強度が大幅に向上することを明らかにした。リラクサー材料の誘電特性と局所構造についても手法班と連携し研究継続中である。[74]

【公募:片山】蛍光X線ホログラフィーによって、回折実験で決めることのできないTaTe₂内の分子状超秩序構造を明らかにした。また、LiVS₂における三量体形成を観測した。[80, Phys. Rev. B 投稿中]○

【公募:小林】小林が開発した反応経路自動探索プログラムGRRMにより中島が見出した有機合成反応におけるフミン生成を抑制する機構を明らかにした。[93]

【公募:焼山】新しい曲面 共役分子を合成し、分子の変形の仕方によって誘電応答特性を制御できることを明らかにした。バタフライ型分子についても放射光実験による構造解析を進めている。[75]

【公募:高津】EuVO₂Hに圧力を印加することでEuイオンの価数が変化し巨大磁気異方性が発現することを見出した。蛍光X線ホログラフィーで価数選択構造解析も行った。[84, Inorg. Chem. 投稿中]

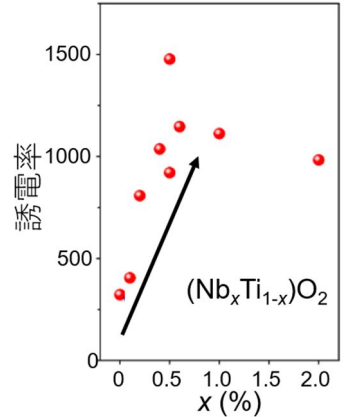
(:プレス発表など行った重要成果、 :連携論文公開済み、○:論文公開済み、 :論文準備中)

(2) 各計画研究で得られた成果、及びそれぞれの計画研究と連携している公募研究で得られた成果

【計画研究を中心とした成果】 (()内は連携先の計画・公募研究 G)

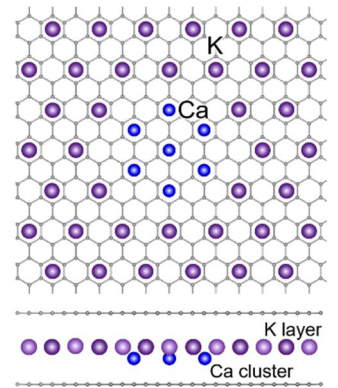
「異価数元素置換によるルチル型 TiO₂ の誘電率大幅増強と機構解明」

異価数元素置換を施したルチル型 TiO₂ である Nb_xTi_{1-x}O₂ (x = 0~0.02) の単結晶を育成し、室温から 4.2 K に至るまでの誘電率の Nb 置換率依存性を調べた。その結果、[001]軸方向の誘電率が高々0.5%程度の Nb 置換によって約 5 倍にまで飛躍的に増大することを見出した(右図)。さらに、[110]軸方向の誘電率との比較することで、Nb 置換による巨大誘電率増強効果が顕著な異方性を有することを明らかにした。加えて、A02 小原 G、A03 中田 G および旭 G (公募)との連携により、巨大誘電率増強の起源となる超秩序構造として、Nb を核とする分子状ポーラロンの形成を明らかにした。[11] (A02 小原 G、A03 中田 G、旭 G(公募))



「超伝導物質 K_{0.7}Ca_{0.3}C₈ のナノ相分離超秩序構造」

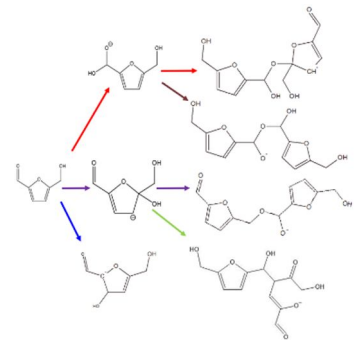
10 K 程度の高い超伝導転移温度(T_c)を示す K_{0.7}Ca_{0.3}C₈ グラファイト層間化合物を合成し、A02 小原 G と連携して蛍光 X 線ホログラフィーを適用し K と Ca 周りの局所構造を調べた。その結果、K と Ca は一様に固溶しているわけではなく、KC₈ 構造と CaC₆ 構造に分離してグラファイト層間に挿入されていることを見出した。更に、X 線吸収微細構造計測も組み合わせ Ca 層が K 層から 1 Å 程度ずれていることも分かった(右図)。T_cは金属層とグラファイト層間距離が短いほど高くなる傾向があるが、Ca 層がグラファイト層に近づくことによって T_c 上昇に寄与していると考えられる。[4] (Front Cover、プレス) (A02 小原 G)



【公募研究を中心とした成果】 (()内は主となる公募研究 G と連携先 G)

「HMF 触媒反応過程の解明」

4-ヒドロキシメチルフルフラール(HMF)を基質とする有機合成反応を予測、提案することを目的として、反応経路自動探索プログラム GRRM を使用してフミン生成機構の初期段階を系統的に調査した。A01-1 中島が開発したアセタール保護によるフミン生成抑制のメカニズムを明らかにすることができた。HMF の工業化のための効率的な反応プロセスの確立に向けた重要な成果である。[93] (小林 G (公募))

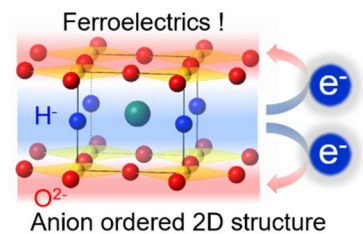


「Al-Nb 共ドーピングによる TiO₂ の絶縁破壊強度の増強」

TiO₂ を高電圧積層セラミックコンデンサに適用することを目指し、等モル量の Al³⁺および Nb⁵⁺イオンを合計 10.0 mol%までドーピングした TiO₂ セラミックスの誘電特性と破壊強度を調査した。誘電率は共ドーピングによって増加しなかった一方、共ドーピング濃度が最大 5.0 mol%までになると、絶縁破壊電界が大幅に改善された。[74] (萩原 G (公募))

【想定・予見していなかった新たな展開による成果】

高津 G (公募)は EuVO₂H 薄膜の合成法を確立し基板からの応力により Eu の価数を制御できることを示してきた。当初、薄膜試料の構造解析により物性発現機構解明を進める予定であったが、バルク試料でも圧力印加で同様の現象が生じるという着想を得て、「高圧下 X 線吸収分光(XAS)測定による EuVO₂H の圧力誘起価数転移の解明」というテーマを新たに立ち上げた。幸い、高圧の専門家の石松が公募班として参画しており、SPring-8 において系統的な高圧 XAS 実験を実施できた。その結果、EuVO₂H において、応力・圧力の制御により、強磁性キャリアである Eu²⁺ の約 20%が Eu³⁺へと価数転移することを見出すと共に、この転移に付随してネオジム磁石に匹敵する巨大な垂直磁気異方性が発現することを明らかにした。当初は予見していなかった公募班同士の連携により得られた成果である。[84] (プレス) (高津 G(公募)、石松 G(公募))



【研究項目 A01-2「社会実装に向けた超秩序構造物質ライブラリーに基づく合成プロセス開発」】

(1) 領域設定期間内に何をどこまで明らかにしようとし、どの程度達成できたか

【計画:課題1】超秩序構造材料の設計(ゼオライト、蓄電池材料、ガラス、半導体材料)

超秩序構造の制御が必ずしも完全に達成できておらず、結果として材料特性に限界があった材料系(ゼオライト、蓄電池材料、ガラス、半導体材料)に焦点をあて、従来限界を超える物性を有する材料創製を実現する。

【計画:課題2】超秩序構造物質のライブラリーをもとに実際にデバイスを試作
超秩序構造の計測に基づくライブラリーの充実化と、そのデータを用いた材料の高性能化に取り組みデバイスの性能向上まで目指す。

【計画:課題3】スケールアップ合成プロセス開発

ゼオライトを中心として合成プロセスの大幅な高速化、高効率化を目指す。さらに、その過程における超秩序構造の変化を追跡し反応機構を解明する。

【公募:岸本】動的超秩序構造に立脚した「マイクロ波触媒作用」の学理開拓

最先端のオペランド計測技術を駆使することで、マイクロ波によって誘起される孔内カチオンの動的構造を理解し、それらを能動的に設計するための熱力学パラメータの確立を目指す。(A01 谷口 G とも連携)

【公募:大窪】機械学習による NMR パラメータの解釈と原子構造推定データフロー

データ科学を援用し、NMR パラメータから 3 次元原子構造を推定するデータフローを構築し、ガラスやゼオライトなどにおける未知の超秩序構造を解明する。

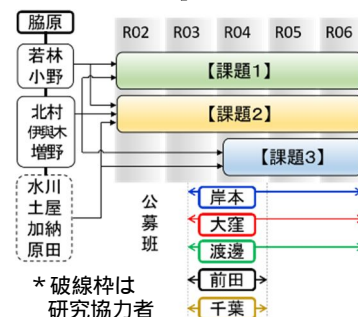
【公募:前田】金属ホスホネート MOF 類縁化合物における構造欠陥の解明と制御

無機有機ハイブリッド多孔体である AlMepO 多形におけるドーピング骨格置換体の合成と置換サイトの解明及び MBP-1 における構造欠陥の解明とその制御の 2 つの課題に取り組む。

【公募:千葉】高分子のホストゲスト共結晶構造・共アモルファス構造の探索

Isotactic poly(4-methyl-1-pentene) (P4MP1)と呼ばれる結晶性高分子に溶媒を吸蔵させた際に生じる、アモルファスが形成する超秩序構造を量子ビーム計測等により解明する。(A02 小原 G とも連携)

【公募:渡邊】次世代電子素子中の超秩序構造の機械学習ポテンシャルによる解析法の高度化とその応用
種々の超秩序構造を明らかにできる精度を有する機械学習ポテンシャルの作成法を確立し、原子構造、原子ダイナミクスを解明する。さらに、物性との相関を解析する方法を開発する。(A03 中田 G とも連携)



【計画:課題1】SiO₂ ガラスの透明度が計算予測よりも大幅に低い 0.8 GPa で最高になることを明らかにした。SiO₂ 膜では、熱流を自在に制御できるメカニズムを発見した。また、無容器法で合成した 25R₂O₃-75MO₃ (R:希土類、M: W or Mo)において、熱膨張率を R³⁺イオンの半径によって制御できることを明らかにした。これらの系に潜む超秩序構造についても計測班と連携し理解が進んでいる。[1,2,6,7]

【計画:課題2】TiNb₂O₇を負極に用いた Li イオン電池において、高い初期放電容量(270 mAh g⁻¹以上)の達成と約 10%の容量維持率の向上に成功した。さらに、熱処理等の合成条件を最適化することによって、電池性能が改善されることを示した。この機構について、超秩序構造ライブラリーに上げた TiNb₂O₇の座標データに理論班がトポロジカル解析を適用し詳しく検討した。[3]

【計画:課題3】ゼオライト触媒において、有機物を導入することにより Si/Al 比率を制御できることや適切なエージングプロセスにより従来 5~14 日間を要した水熱合成時間を 24 時間に短縮可能であることを示した。放射光計測により、これらの合成プロセスを追跡しアモルファスから結晶へと変化する様子などを検討し合成手法の更なる高度化を進めている。[15]

【公募:岸本】マイクロ波によってゼオライト触媒の活性点へ熱エネルギーを集中させることで省エネルギー化および高度な触媒反応制御が可能であることが分かった。[85]

【公募:前田】Ga 置換 AlMepO において Ga が特定の骨格位置を占有していることが分かるとともに、MBP-1 では Mn 欠損部位がランダムに分布した原子配列を明らかにした。現在論文執筆中である。

【公募:千葉】赤外分光と X 線小角散乱により、有機溶媒が P4MP1 フィルムの非晶域へ選択的に吸蔵されることが分かった。逆モンテカルロ法による構造モデリングにも取り組んでいる。[89]○

【公募:大窪】Y³⁺添加ホウ酸塩ガラスの構造を第一原理分子動力学計算で調査し他の希土類では見られない YBO₃ の 3-ring を伴う超秩序構造を発見した。高屈折率ガラスの設計に有用な知見である。[81]

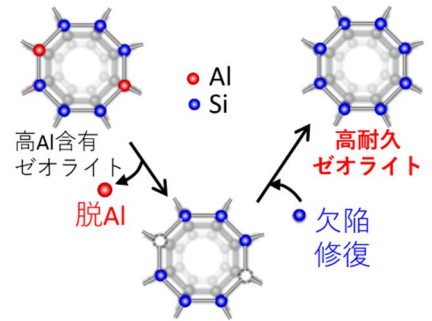
【公募:渡邊】開発した機械学習ポテンシャルを用いて欠陥を含む GaN や WS₂ 等の半導体のフォノン分散と電子状態が精度よく計算できることを示し、欠陥が物性に及ぼす影響を明らかにした。[79,100]

(2) 各計画研究で得られた成果、及びそれぞれの計画研究と連携している公募研究で得られた成果

【計画研究を中心とした成果】 (() 内は連携先の計画・公募研究 G)

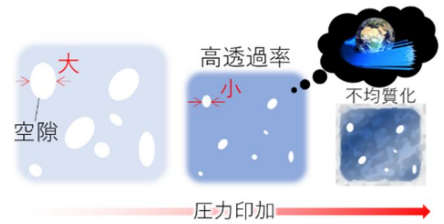
「高耐久ゼオライト創製のためのプロセス開発」

触媒、吸着剤として有用なゼオライトの耐久性の鍵を握るのが、シリコンとアルミニウムの比率(Si/Al)である。脇原 G では細孔内に有機物を導入することで骨格構造を保持しながら Al を除去できることや、アモルファス状態において熱処理条件を変更することで Si/Al 比を制御できることを見出した。独自の欠陥修復技術と組み合わせ、目標としていた超耐熱ゼオライト deNOx 触媒創製の道筋を立てることができた。[13, 15] (プレス)



「低圧プロセスによる高透過性シリカガラスの創製」

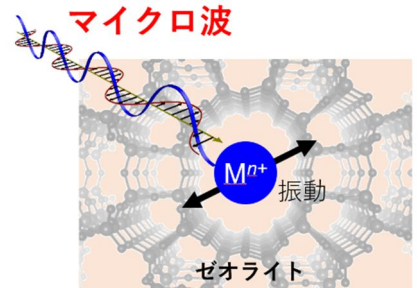
光ファイバーを使って多くの情報を効率的に伝送するには、主材料であるシリカガラスの透明度を高めることが必要である。本研究では約1万気圧までの圧力範囲でガラスを合成し構造や透明度を系統的に調査した。その結果、構造変化が計算予測よりも大幅に低い0.8万気圧で生じ、透明度も最高になることが観測された。本成果により、シリカガラスの透明度向上に必要な圧力が計算による予測値の約5分の1で済むことが実証された。今後、光学材料や先端技術分野での新たな応用が期待される。[2] (プレス) (A02 小原 G)



【公募研究を中心とした成果】 (() 内は主となる公募研究 G と連携先 G)

「マイクロ波誘起の動的超秩序構造による触媒反応活性化」

マイクロ波照射による電子・イオン振動の選択的誘起は化学反応高効率化に向けた新手法として有望視されている。本研究ではゼオライト細孔に導入した金属イオンのマイクロ波加熱について調査した。Cs⁺を交換したFAU型ゼオライトのメタン酸化反応では、含酸素生成物の選択率が通常加熱よりも高い97.3%に達することが分かった。さらに、種々の金属イオンとゼオライト骨格の組み合わせについてマイクロ波加熱挙動を調査し、1価カチオンが比較的小さい細孔に入っていると加熱されやすいことを見出した。[85] (プレス) (岸本 G(公募))

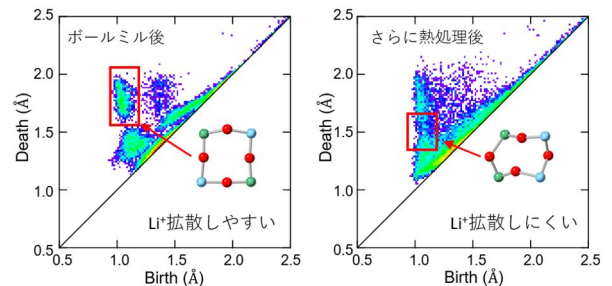


「機械学習ポテンシャルを用いたWS₂薄膜中の欠陥挙動の解析」

2次元半導体材料として注目されているWS₂薄膜用に機械学習ポテンシャルを作成しMD計算を行った。比較的低い欠陥密度(S/W比1.9)ではS空孔に向けて周囲の原子が緩和した構造が現れ、S/W比率1.7ではS空孔が頻りに移動する様子が見られた。DFT計算によると、S/W比が1.7では欠陥準位が増えたためにバンドギャップが消失する一方、S/W比率1.9ではそれが保持されていた。この計算結果は、S/W比が1.7程度になるとトランジスタ動作しないという実験結果と整合する。高性能な薄膜製造プロセス開発の足掛かりとなる成果である。[79] (渡邊 G(公募))

【想定・予見していなかった新たな展開による成果】

A01-2 北村はLiイオン電池の負極材料として注目されているTiNb₂O₇の中性子・X線全散乱と逆モンテカルロ法により原子座標を導出した。当初この成果を論文化する予定であったが、座標データを超秩序構造ライブラリーに上げたところ、理論班の目に留まりトポジカル解析を実施することとなった。その結果、ボールミル処理した試料の歪んだリング成分が熱処理により低減し対称性の高いリングが増加することが明らかとなった(右図)。熱処理後の試料の方が放電容量と容量維持率が優れていることから、この歪みの少ないリングがLiイオン伝導に寄与していると考えられる。[3] (プレス) (A02 小原 G、A03 志賀 G)



【研究項目 A02-1「先端量子ビーム手法群によるナノ・メソスケール元素選択構造計測」】

(1) 領域設定期間内に何をどこまで明らかにしようとし、どの程度達成できたか

【計画:課題1】量子ビームを用いた極微量・微小領域計測技術の確立

0.1 at%の微量ドーパント、10 μmの微小領域の計測を目標に、X線・電子線を中心とした量子ビーム計測技術の開発を行う。

【計画:課題2】マルチスケール元素選択構造計測環境の確立

X線異常散乱、X線小角散乱、X線吸収微細構造計測を併用することでマルチスケール元素選択構造計測を実施し超秩序構造を精密に観測する。

【計画:課題3】複合装置による極限環境下における計測への挑戦

課題1の計測技術を基盤として、高温や高圧などの極限環境下における超秩序構造計測に挑戦する。特に高圧力下蛍光X線ホログラフィーの技術開発に注力する。

【公募:清水】ウルツ鉱型強誘電体の抗電界低減を可能とする置換カチオン探索

ウルツ鉱型強誘電体の抗電界が、元素置換による構造変化に伴って顕著に低下する挙動について、置換元素の果たす役割や局所構造の解明を行うことを目的とする。

【公募:松尾】ペロブスカイト型強誘電体における欠陥双極子の制御と超秩序構造設計

強誘電体における欠陥双極子などドメイン構造や分極配列をドーパント誘起超秩序構造と位置付け、電気物性との関係性を明らかにする。これに基づき機能設計指針の構築を目指す。(大山 G(公募)とも連携)

【公募:富永】Bi系 - 族半導体混晶の機能発現機構の解明に向けた秩序構造の可視化と制御

GaAsに添加したBiにより形成される点欠陥・複合欠陥を含む超秩序構造を、蛍光X線ホログラフィーを用いて可視化し、Bi添加による禁制帯幅の急激な減少などの理由を明らかにすることを目的とする。

【公募:中嶋】強誘電性半導体におけるドーパント誘起超秩序構造の外場印加下の機能解明

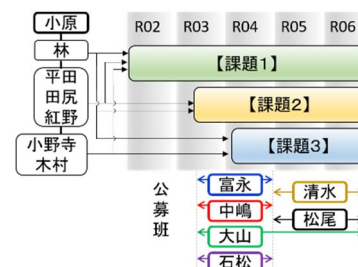
遷移金属元素(TM)ドーパ BiFeO₃ 強誘電性半導体における TMO₅ ドーパント誘起超秩序構造の外場印加下における機能性を、蛍光X線ホログラフィーを用いて解明すること目的とする。

【公募:大山】白色中性子ホログラフィーでの高分解能多検出器系の実装による軽元素超秩序構造の観測

中性子ホログラフィー技術の高分解能化によりドーパント誘起超秩序構造における軽元素挙動の観測技術を確認し、超秩序構造が誘起する物性に対する軽元素の役割解明を目指す。(松尾 G(公募)とも連携)

【公募:石松】Fe-Fe 原子相関を超秩序構造とした不規則鉄合金の構造可視化

異種原子がランダムに配置した Fe 合金の構造決定法を確立し、高圧領域も含め原子配列を可視化する。また、高圧下蛍光X線ホログラフィー計測技術確立も新たな目的に設定する。(A01 脇原 G とも連携)



【計画:課題1】マイクロビーム X 線によりセラミックスの蛍光 X 線ホログラフィー実験を実施し、数十 μm の結晶粒のホログラム取得に成功した。さらに、0.1 at%以下のドーパント計測にも成功した。また、Å 電子回折法により SiO₂ ガラスにおいてナノスケール柱状構造を見出した。[23,28,32]

【計画:課題2】X線異常散乱、回折、吸収分光、小角散乱を用いたマルチスケール計測によりガラスセラミックス材料中の Zr 周りの構造を詳細に計測し Zr-O-Si/Al からなる超秩序構造を見出した。[29]

【計画:課題3】高圧蛍光 X 線ホログラフィーの技術開発を進めた。広開口ダイヤモンドアンビルセルの開発、ノイズの小さいナノ多結晶ダイヤの導入、蛍光 X 線抽出のための金属フィルターの利用などにより 10 GPa 以上の圧力下におけるホログラム測定を実現できた。[23, *J. Synchrot. Radat.* (投稿中)] ○

【公募:清水】Sc 添加 AlN の抗電界の Sc 濃度依存性を調べ抗電界が概ね Sc 濃度に対して線形に変化していることが明らかにした。さらに手法班と連携して Sc 周りの局所構造解析を進めている。[91]○

【公募:松尾】NaNbO₃ に Ca を添加することで反強誘電相が広い温度領域に渡って安定化することを見出し、その原因が Na 空孔を伴う複合欠陥であることを突き止めた。[70]

【公募:富永】Bi 添加 GaAs の TEM 観察により Bi の凝集構造を観測した。また、蛍光 X 線ホログラフィーにより Bi が As サイトを占有することが分かり、現在論文執筆中である。[92]○

【公募:中嶋】電場印加下におけるコッセル線および蛍光 X 線測定を行い、強弾性ドメインスイッチング途中の中間ドメイン構造の存在を明らかにした。[77]

【公募:大山】中性子ホログラフィーによって BaTiO₃ の酸素可視化に成功した。また、磁気散乱中性子ホログラフィーの開発や Sm ドープ YbB₆ の蛍光 X 線ホログラフィー解析にも取り組んだ。[82]

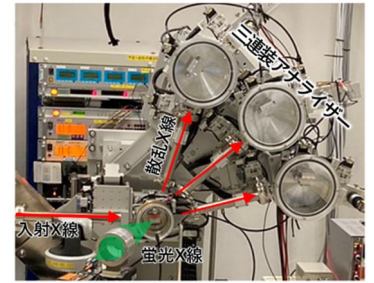
【公募:石松】Fe₅₅Ni₄₅ 合金において磁気不安定領域で圧力誘起インバー効果が起こることを示した。また、SrTiO₃ の高圧蛍光 X 線ホログラフィーに成功した。[101]

(2) 各計画研究で得られた成果、及びそれぞれの計画研究と連携している公募研究で得られた成果

【計画研究を中心とした成果】 ()内は連携先の計画・公募研究 G)

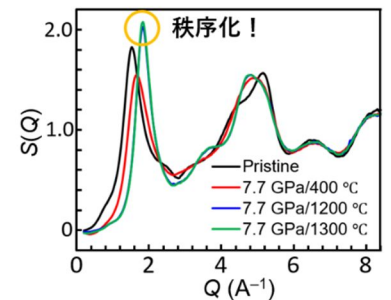
「蛍光 X 線ホログラフィー/X 線異常散乱複合計測装置の製作」

超秩序構造計測に特化した蛍光 X 線ホログラフィー/X 線異常散乱複合計測装置を製作し 2022 年 3 月に SPring-8 BL47XU に導入した。3 年間で 37 課題 (135 日) を実施し A01 が提供する試料を精力的に解析した。領域終了後も課題数は維持しており、今後も活用が見込まれる。[22] (プレス) (A01 谷口 G・脇原 G)



「超秩序高密度シリカガラスの創製」

温度/圧力の印加により SiO₂ ガラスの高密度化を試みた。1200 °C/7.7 GPa と室温/20 GPa で合成されたガラスは同じ密度であるにも関わらず、構造因子 S(Q)に現れる First Sharp Diffraction Peak (FSDP)の高さが異なっていた。前者の高温圧縮ガラスのみ永久高密度化することも明らかにできたが、これは FSDP に現れた構造的な違いに由来すると考えられる。さらに 1300 °C/7.7 GPa の条件で世界一構造秩序のある超秩序永久高密度ガラスを合成することに成功した。[32,45] (プレス) (A01 脇原 G、A03 志賀 G)



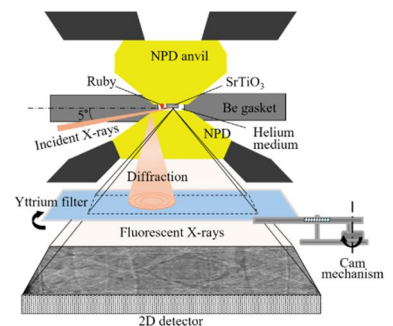
「X 線異常散乱によるアルミノケイ酸塩ガラス中の ZrO₂ 結晶核形成過程の観察」

ガラスセラミックスに用いられる ZrO₂ 添加リチウムアルミノケイ酸塩ガラスを対象に結晶核形成初期過程における構造変化を、回折、小角散乱、吸収分光、そして異常散乱を駆使したマルチスケール構造計測によって解析した。X 線異常散乱によって、Zr が O を介して Si や Al と連結した Zr-O-Si/Al 結合 (稜共有) からなる超秩序構造を見出し、初期の結晶核の構造を明らかにした。[29]

【公募研究を中心とした成果】 ()内は主となる公募研究 G と連携先 G)

「微小領域および高圧力下蛍光 X 線ホログラフィーの開発」

1 μm 程度に集光された X 線により数十 μm の結晶粒からなる圧電材料 (Ba, Ca)(Zr, Ti)O₃ の Zr のホログラムの取得に成功した。この技術を基盤として高圧領域へと展開すべく手法開発を進めた。特注の広開口ダイヤモンドアンビルセルと愛媛大学開発のナノ多結晶ダイヤモンドを測定系に組み込み、SrTiO₃ の Sr-Kα 線の強度を二次元検出器にて記録した。その結果 13.3 GPa の圧力下でコッセル線が観測され、高圧下蛍光 X 線ホログラフィー測定に初めて成功した。[23, *J. Synchrotr. Radiat.* (投稿中)] (石松 G(公募)、A01 谷口 G、A03 志賀 G)



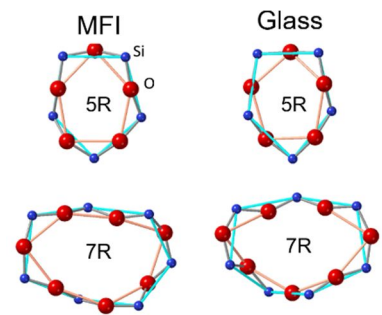
「中性子ホログラフィーによる BaTiO₃ 強誘電体における酸素の可視化」

軽元素に敏感な中性子ホログラフィーを用いて BaTiO₃ の酸素原子を可視化することに成功した。本手法は添加元素を標的とすることもでき、他手法では解明できない強誘電性超秩序構造を明らかにできる可能性を秘めている。[82] (Editor's Pick) (大山 G (公募))

【想定・予見していなかった新たな展開による成果】

「シリカ多形のトポロジカル解析」

SiO₄ 四面体頂点共有ネットワークで構造が記述できる結晶、ガラス、ゼオライトのトポロジカル解析を実施した。当初、これらに類似性は見られないと予測していたが、ガラスと MFI ゼオライトを比較したところ、右図のような極めて形状が類似したリングを見出した。さらに、パーシステントホモロジー解析により、コーサイト、シリカガラス、MFI ゼオライトに intertetrahedral な O-O 相関が存在することも見出した。



この相関が低密度の MFI に存在するのは予想外であった。本成果は結晶とアモルファスを同じ土俵で取り扱う道筋を示しており、学理構築の足掛かりとなった。[25] (優秀論文賞) (A01 脇原 G、A03 志賀 G)

【研究項目 A02-2 「超秩序構造物質のマクロスケール物性と局所電子状態の計測」】

(1) 領域設定期間内に何をどこまで明らかにしようとし、どの程度達成できたか

【計画:課題1】微小重力下と地上におけるマクロスケール物性の測定

国際宇宙ステーション(ISS)の静電浮遊炉並びに NMR や蛍光 X 線装置などの地上装置群を用いて、ガラス及び機能材料結晶に存在する超秩序構造の解明に資する詳細なデータを取得する。

【計画:課題2】硬 X 線光電子ホログラフィーによる「超秩序構造」の測定

硬 X 線対応の光電子ホログラフィー分光装置の開発及び SPring-8 での性能確認を目標とし、取り扱える試料の拡大を図る。

【計画:課題3】「超秩序構造」と電子状態の同時計測

SPring-8 の BL25SU に設置した軟 X 線光電子ホログラフィー分光装置のエネルギー分解能向上や試料環境整備を通して、様々な物質の構造と電子状態の同時測定を実施し機能性との関連を解明する。

【公募:秋山】軽元素添加によって実現する界面超伝導の転移温度高温化

2次元型物質に対して、原子のインターカレーションや修飾を行うことにより、超秩序構造と電子状態を大幅に変調させ、新しい物性を創発させることを目的とする。

【公募:新井】磁場によって誘導される蛋白質超秩序構造化の機構解明

生物の磁覚と関係する ISCA1 柱状多量体を結晶/非晶質境界の超秩序構造に位置づけ、磁場応答的な秩序構造化の機構や、その要因となる構造的特徴を明らかにすることを目的とする。(A02 小原 G とも連携)

【公募:藤井】非晶質絶縁膜/ダイヤモンド単結晶界面極薄領域の超秩序構造

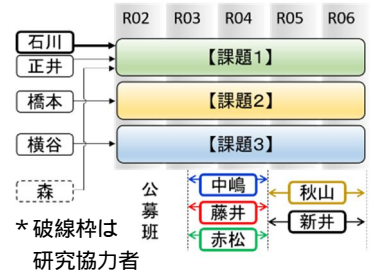
パワーデバイスとして有望なダイヤモンドと Al₂O₃ 絶縁膜との界面構造に潜む欠陥を光電子ホログラフィーによって解明する。水素量を変化させて成膜することで界面欠陥を抑制し、ダイヤモンドトランジスタの飛躍的な高移動度化を実現する。(A02 石川 G とも連携)

【公募:赤松】層状ペロブスカイトの層間侵入アニオンが形成する超秩序構造の解明と電気的秩序の制御

NaRTiO₄ (R: 希土類)単結晶薄膜にフッ素を導入し光電子ホログラフィーを用いて局所構造を明らかにし、異種アニオンによる超秩序構造の形成の機構を明らかにする。(A01 谷口 G、A02 小原 G とも連携)

【公募:中嶋敦】単一の原子数と組成に秩序化された合金担持触媒の構造活性評価

金属ナノクラスターの構成原子数と組成を精密に制御することによって、担体表面上に均一担持して秩序化させたナノクラスター触媒を創製しその構造評価を行うことを目的とする。



【計画:課題1】ISS において地上では困難な高融点希土類酸化物融体の物性測定に成功した。また、線量計に用いられる銀添加リン酸塩ガラスの構造を NMR、回折、XAFS 測定などにより詳細に解析し、ラジオフォトルミネッセンスの新たな機構を明らかにした。[29,31,42]

【計画:課題2】硬 X 線用に新たな電子エネルギー分析器を開発し、硬 X 線光電子ホログラフィー装置を完成させた。SPring-8 において実験を実施し、数 keV 程度の運動エネルギーの光電子を分光し、対応する光電子ホログラムを計測することに成功した。現在論文執筆中である。

【計画:課題3】Sn-doped La(O,F)BiS₂ 超伝導体に対する光電子ホログラフィー測定から、Sn が Bi サイトに置換し価数が+2 価であることを明らかにした。また、超伝導候補物質 Sr₂IrO₄ を計測し超伝導発現を妨げていると考えられる酸素欠損による Ir³⁺イオンの形成を見出した。[35,41]

【公募:秋山】超伝導を示す Yb 添加グラフェンの光電子ホログラフィー測定を実施し、Yb³⁺は SiC 基板を終端し Yb²⁺はグラフェン層間に侵入していることが分かった。現在論文執筆中である。

【公募:新井】空気酸化を回避可能な嫌気環境下 ISCA1 大量精製システムを構築した。X 線小角散乱により、ISCA1 は生物種によって異なった磁場応答性や会合構造を示すことが明らかになった。[83]

【公募:藤井】光電子ホログラフィーにより水素終端ダイヤモンド上の絶縁性 Al₂O₃ 膜の界面において、C-O-Al-O-C 結合を見出した。高性能ダイヤモンドデバイスを作製する上で、C-O 結合が有用な指標であることを示すことができた。[86,98]

【公募:赤松】LiCoF₃ のトポケミカル合成直後のサンプルにおいて、c 軸に対して垂直な面に Li または Co が隔層で偏在するコランダム構造のような超秩序構造が存在することが示唆された。[99]

【公募:中嶋敦】Al₁₃ 超原子と同等以上の化学的安定性を示す B@Al₁₂ 超原子を創製した。単一の元素の超原子では構成原子数の違いだけが制御変数であるが、異なる元素を組み合わせることで合成できる超原子の種類やその安定性の制御の可能性が格段に高まることを示した。[78,87,97]

(2) 各計画研究で得られた成果、及びそれぞれの計画研究と連携している公募研究で得られた成果

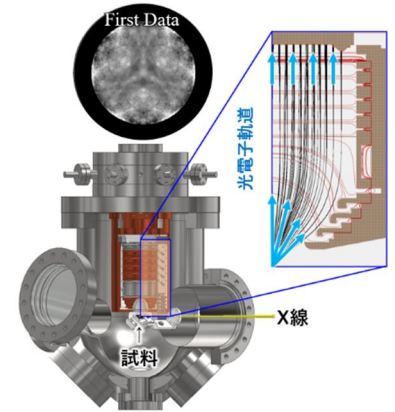
【計画研究を中心とした成果】 (()内は連携先の計画・公募研究 G)

「微小重力下での超高温酸化物融体の物性計測」

国際宇宙ステーションの微小重力を活用し、これまで困難であった 2,000 以上の高融点酸化物融体の物性測定に成功した。この技術を用いて、MgO-SiO₂ など無容器法でガラス化する酸化物の融体物性を体系的に測定し、A02-1 班の構造測定と合わせてガラス化する融体のマクロ/ミクロの特徴を明らかにした。[31,42] (A01 脇原 G、A02 小原 G、A03 志賀 G)

「硬 X 線光電子ホログラフィー装置の開発」

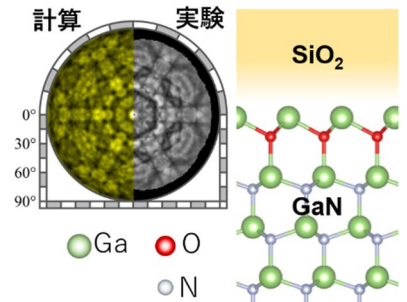
軟 X 線で実績のある阻止電場型エネルギー分析器 (RFA) を応用して硬 X 線光電子ホログラフィー実験装置を開発した。この新しい電子エネルギー分析器では、精密加工された 30 μm のメッシュを光電子が透過することでエネルギー分解能 $E/\Delta E$ は 10,000 を超える。Bi₂Te₃ の Bi 2d_{5/2} (3380 eV) と MoS₂ の Mo 3d_{5/2} (2108 eV) 軌道の光電子を分光することに成功し、各々の光電子ホログラムを取得できた。領域終了後も測定対象を拡大していく予定である。(A02 小原 G、A03 志賀 G)



【公募研究を中心とした成果】 (()内は主となる公募研究 G と連携先 G)

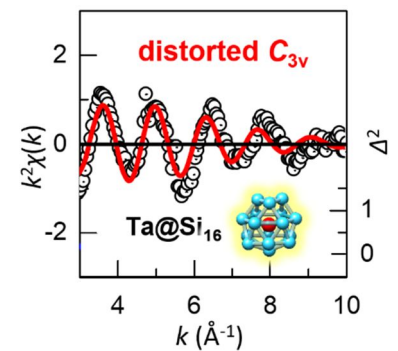
「次世代パワーデバイスの結晶/アモルファス境界の超秩序構造解明」

ダイヤモンドや GaN を始めとする半導体のパワーデバイスでは、アモルファス状態の絶縁膜との界面に存在する欠陥が性能劣化の原因と考えられている。本研究では、非破壊で絶縁膜下の界面構造の立体的計測が可能な光電子ホログラフィーにより、結晶/アモルファス境界の超秩序構造の観測を試みた。その結果、ダイヤモンド/Al₂O₃ 界面では C-O-Al-O-C という架橋構造、GaN/Al₂O₃ 界面では酸化 Ga 構造の形成を見出した。さらに、SiO₂ を絶縁膜とした GaN についても、様々な熱処理条件の試料を準備し放射光計測と理論計算により構造解析を行っており Ga-O 層の形成を確認している。[86,98] (プレス) (藤井 G(公募)、上沼 G(公募)、A03 中田 G・志賀 G)



「Ta@Si₁₆ 超原子の超秩序構造解明」

タンタル原子を内包するシリコンケージナノクラスター (Ta@Si₁₆) は「超原子 (SA)」としての特性を示すことが知られているが、エネルギー的に近接した 3 つの構造異性体 (C_{3v}、T_d、D_{4d}) が存在するため正確な構造は解明されていない。そこで、Ta@Si₁₆ SA のみで構成される超秩序非晶質薄膜を作製し、広域 X 線吸収微細構造 (EXAFS) 解析を嫌気環境下で実施した。実験および計算による Ta L₃ 端 EXAFS スペクトルを比較し、基板上の Ta@Si₁₆ SA は C_{3v} 由来の構造であることを明らかにした。この結果は、新規ナノスケール材料の理解と特性評価において、超秩序構造の重要性を明示するものである。[78,87,97] (プレス) (中嶋(敦)G(公募))



【想定・予見していなかった新たな展開による成果】

「ゼオライトのトポロジーを持ったアモルファス SiO₂」

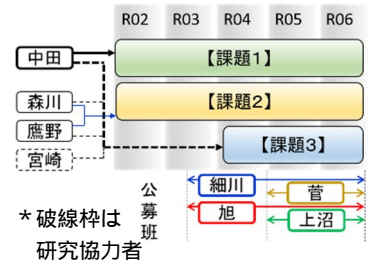
SiO₂ 組成の MFI ゼオライトを室温圧縮するとアモルファス化することが知られている。当初、密度と組成が等しい低温圧縮ガラスの回折パターンと比較して、アモルファス MFI (a-MFI) の構造的特徴を検討する予定であった。しかし、驚くべきことに X 線回折から得られた構造因子が両者でほぼ見分けがつかないほど酷似していることが分かった。a-MFI は永久高密度化するのに対し、低温圧縮ガラスはそうならないことから何らかの構造的差異があるはずである。そこで、結晶構造からスタートした RMC モデリングを実施したところ、ガラスと酷似した構造因子を再現しつつ結晶秩序の痕跡が残った構造モデルを構築できた。ゼオライト触媒の耐久性はアモルファス状態の構造制御が鍵を握ることから本手法は合成プロセスの更なる高度化を推進すると期待される。[34] (A01 脇原 G、A02 小原 G)

【研究項目 A03-1「大規模・高精度な第一原理計算による超秩序構造の機能解明とデザイン」】

(1) 領域設定期間内に何をどこまで明らかにしようとし、どの程度達成できたか

【計画:課題1】大規模第一原理計算による「超秩序構造」の構造・電子状態計算

大規模第一原理計算手法 CONQUEST を用いて、実験のスケールに近い大規模な構造モデルを構築し、様々な超秩序構造及びその電子状態を高精度に解明・予測する。



【計画:課題2】「超秩序構造」がもたらす機能発現機構の解明

多彩な超秩序構造を表現できる様々な力場の分子動力学計算や遷移状態理論に基づく反応解析手法を開発し、超秩序構造がもたらすダイナミクスや化学反応の支配要因の解明を図る。

【計画:課題3】新規機能性超秩序構造物質のデザイン

超秩序構造に関して得られる複雑な計算結果を、新たな機械学習手法を開発することにより解析する。これにより超秩序構造と物性の相関を明らかにし、新規材料設計の指針を得ることを目指す。

【公募:細川】放射光を用いた機能性ゼオライトの原子配列・電子構造そしてダイナミクスの研究

ゼオライトが持つ触媒や吸着剤としての高い機能性を誘起する超秩序構造を、元素選択性をキーとする放射光実験とそれをサポートする密度汎関数理論により解明する。(A01 脇原 G、A02 小原 G とともに連携)

【公募:旭】同時ドーピングされた金属酸化物材料の巨大誘電率発現機構の解明と材料設計

複合欠陥を含む誘電体材料に着目し、その誘電特性との相関を系統的な理論計算によって把握し、高い誘電率を発現させる微視的な起源を理解し、材料設計を行う。(A01 谷口 G、A02 小原 G とともに連携)

【公募:菅】酸化物中の水素超秩序構造の観測と水素機能の開拓

菅 G が独自開発してきた水素吸蔵酸化物エピタキシャル薄膜に対して、第一原理計算による構造モデルや光電子ホログラフィー計測を活用し、吸蔵された水素が誘起する超秩序構造を解明することを目指す。これに基づいて、新しい水素機能の開拓に取り組む。(A02 石川 G とともに連携)

【公募:上沼】非晶質領域の局所構造計測に基づく MOS 界面制御

光電子ホログラフィーと理論計算による界面評価技術を確立し、様々な条件で作製した GaN パワーデバイスの電気特性と界面原子構造の相関を解明する。これによりランダム性を含む超秩序構造を理解し、新しい界面制御指針を得ることを目指す。(A02 石川 G、A03 中田 G とともに連携)

【計画:課題1】複雑な物質の構造解析、構造探索、構造モデリングを可能とするため、高精度かつ高効率な大規模第一原理計算及び構造モデルの特徴を抽出する解析手法の開発を行った。数千原子を含む精密非晶質構造モデルの構築、半導体の複雑な欠陥構造の予測、TS-LPP 法という独自の次元削減手法の提案など成果があがった。[49,50]○

【計画:課題2】Nb 添加による TiO₂ の誘電率の大幅増強に関して、第一原理計算により Nb を核とする分子状ポーラロンが起源であることを突き止めた。また、活性中心に[2Fe-2S]クラスターを含む植物型フェレドキシンの分子動力学シミュレーションから、ペプチド結合の回転に側鎖が連動することを見出し、電子伝達機構を理解するための新たな知見が得られた。[60, *J. Am. Chem. Soc.* 二回目査読中]

【計画:課題3】環境汚染分子 N₂O の MOR ゼオライトによる吸着に関する第一原理計算を行い、N₂O 分子吸着に関して最適な担持金属、担持サイト、骨格構造の提案につながった。また、大量のヘムタンパク質の構造データを機械学習させ、ヘムの構造歪みと物理化学的性質との相関を網羅的に解析した結果、特定の構造的特徴がヘムタンパク質の酸素輸送などの機能と強く相関していることを見出した。構築した分類器は生体分子の機能性予測・設計に有用である。[48,59]

【公募:細川】X 線回折と異常散乱によりゼオライトに担持した金属のクラスター化を示唆する結果が得られた。また、X 線非弾性散乱ではガラスで見られるボゾンピークと似た特徴を観測した。[91]

【公募:旭】第一原理計算等により様々な酸化物材料に元素ドーピングした時の誘電率をデータベース化し、構造から誘電率を予測するための機械学習モデルを構築した。その結果、ある特定の Ti-O 結合距離で誘電率が増大することを見出した。[89,95]

【公募:菅】菅 G が合成した Sr(Fe_{1-x}Co_x)O_y 水素吸蔵薄膜の第一原理計算を行ったところ、プロトン挿入を促進する鍵となる酸素空孔の規則的な配列を見出すことができた。[72]

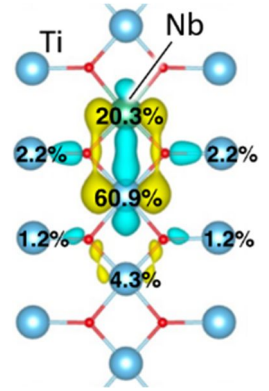
【公募:上沼】酸化物絶縁膜と GaN との界面における酸化 Ga 構造の形成を見出した。現在、得られた知見をもとに、デバイス特性を引き出すための最適な熱処理条件を探索している。[98]

(2) 各計画研究で得られた成果、及びそれぞれの計画研究と連携している公募研究で得られた成果

【計画研究を中心とした成果】 (()内は連携先の計画・公募研究 G)

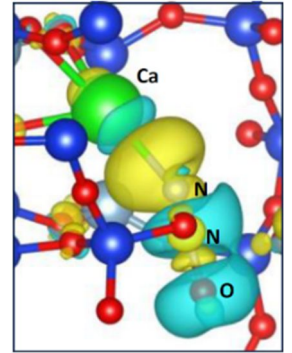
「元素ドーピング TiO₂ の巨大誘電応答の起源解明」

A01 谷口 G が TiO₂ 中のわずかに 0.5% の Ti を Nb に置き換えることで、比誘電率が約 5 倍になることを示した。この起源について詳細な理論研究を行った結果、5 価の Nb イオンの置換により、Ti⁴⁺ が一部 Ti³⁺ となりポーラロンを形成することが分かった。これが Nb の片側に局在している状態と反対の側に局在している状態では c 軸方向に異なる分極を持っており、電場印加によって両状態のスイッチングが生じることで巨大誘電応答を引き起こすことを明らかにした。現在、複数元素添加の検討を行っており、更なる誘電増強をもたらす超秩序構造提案に繋がると期待できる。[11, *J. Am. Chem. Soc.* (2 回目査読中)] (A01 谷口 G、A02 小原 G、旭 G (公募))



「ゼオライトにおける分子吸着性能のサイト依存性解析」

環境汚染分子 N₂O の MOR ゼオライトによる吸着に関する第一原理計算を行った。その結果、物理吸着がメインの N₂O 分子よりも、骨格内の O 原子との水素結合によって吸着される H₂O 分子の方が優先的に骨格内に捕獲されることが分かった。さらに、担持金属としては、Ca の方が Na よりも電子移動が大きく N₂O 分子吸着エネルギーが大きくなることが示された。この結果は実験結果とも良く一致した。また 8 員環に担持金属が存在する場合に吸着エネルギーが大きくなる傾向も示された。最適な担持金属、担持サイト、骨格構造を有する吸着性能の高いゼオライトのデザインにつながる成果である。[48] (A01 脇原 G)



「計算に基づいた生体試料の活性中心を担う超秩序構造の機能解明」

植物型フェレドキシンは活性中心に [2Fe-2S] クラスターを含む。分子動力学シミュレーションを実施したところ、還元型状態でのペプチド結合の回転は約 1 ns で完了し、Phe65 の側鎖の配向がこれに連動することが示され、電子伝達機構の一端が解明された。また、タンパク質データベースより得られるヘムのポルフィリン歪みと軸配位子を機械学習させ、ヘムタンパク質の機能予測分類器を構築した。重要度の高い特徴量として、ドーミング、サドリング、ラフリングの歪みなどを抽出することができた。この結果は、ヘムポルフィリンの歪みと軸配位子が、酸素貯蔵・輸送機能および酸化還元酵素機能と強い関係があることを示唆している。[59,60] (A01 谷口 G)

【公募研究を中心とした成果】 (()内は主となる公募研究 G と連携先 G)

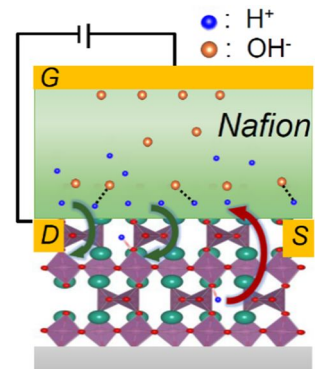
「TiO₂ の構造及びダイナミクス計算手法の検討と誘電率予測」

一般的に用いられる 3 種類の PAW (Projector Augmented Wave) ポテンシャルが、ルチル型 TiO₂ および他の 4 つの相 (アナターゼ、ブルッカイト、パイライト、蛍石型) における格子定数、フォノン振動、誘電率に与える影響を系統的に検討した。その結果、PBEsol と Ti を中心とする標準的な PAW ポテンシャルの組み合わせにより実験値を再現することが分かった。これよりもコスト高い計算では、計算時間が大幅に増える一方で精度の向上はわずかであった。非調和性の大きな物質における適切な計算条件を選択する上でベンチマークとなる成果である。[95] (旭 G (公募))

【想定・予見していなかった新たな展開による成果】

「金属酸化物への水素ドーピングによる電子物性制御」

水素の電気化学的挿入は新たな物性制御手法として有望である。菅 G (公募) は Sr(Fe_{1-x}Co_x)O_y (SFCO) の電気抵抗が水素脱挿入により数桁変化することを見出していた。当初、蛍光 X 線ホログラフィーによる実験研究を進める予定であったが、ビームタイムを確保することができず、改めて A03 中田 G と連携し理論的な検討を進めた。その結果、SFCO の酸素空孔の秩序配列が Co 含有量を増加させると安定化し、それがプロトン挿入を促進する鍵となることが明らかとなった。なお 2023 年度後期に光電子ホログラフィーを実施でき論文を執筆している。[72] (プレス) (菅 (公募))



【研究項目 A03-2 「数理情報科学に基づく超秩序構造の網羅的解析」】

(1) 領域設定期間内に何をどこまで明らかにしようとし、どの程度達成できたか

【計画:課題1】超秩序原子像解析

原子分解能ホログラフィー、Å 電子回折、CT-XAFS などの最先端の構造計測によって得られるデータから超秩序構造の原子配列を高精度・高効率に推定する手法の開発に取り組む。

【計画:課題2】多体秩序の記述子と機械学習

パーシステントホモロジー等の応用数学の理論を用いて、化学結合ネットワーク、原子間の空隙・穴に基づく構造秩序解析法を開発し、その超秩序構造と物性の関係を明らかにするための研究を推進する。

【計画:課題3】機械学習プロセス設計

超秩序構造の記述子と物性のデータから、所望の物性をもつ物質設計や新規化合物の合成プロセスを効率化する手法を開発するための研究に取り組む。また、ソフトウェアを開発し、実験研究者の構造秩序解析を容易にし、超秩序構造に基づく材料設計の高効率化を図る。

【公募:江草】電子顕微鏡直接観察に基づく Mg 合金中の溶質原子クラスター解析

電子線・放射光の2種類の線源による解析手法を組み合わせ、Mg-Zn-Y 合金中に形成される溶質クラスター構造および電子状態を解明することを目的とする。(A02 小原 G とも連携)

【公募:田畑】機能性酸化物薄膜における傾斜格子ひずみ誘起超秩序構造とスピン・双極子物性

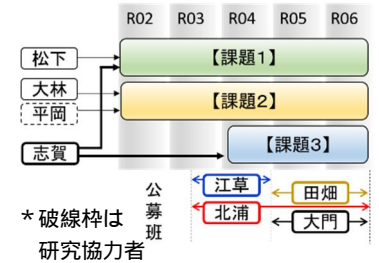
ガーネット型酸化鉄の希土類置換及び薄膜形成時の傾斜格子歪導入効果により、双極子秩序フォノンのソフト化を目指す。さらに、室温スピングラス材料の原子分解能ホログラフィー解析を実施し、高いスピン凍結温度を誘起する置換元素の占有サイトとその周辺構造を解明する。(A02 小原 G とも連携)

【公募:北浦】電子・陽電子プローブによって解き明かす酸化クロム膜における超秩序構造の階層性

異なる酸素ドーパ量 x の酸化クロム($\text{CrNi}_{1-x}\text{O}_x$)エピタキシャル膜において、各元素周辺の局所構造およびクロム原子空孔の存在とその周辺の原子分布を、光電子ホログラフィーと陽電子消滅分光によって調べ、酸素とクロム空孔からなる複合欠陥を原子レベルで明らかにする。(A02 小原 G・石川 G とも連携)

【公募:大門】CoDELMA の開発と原子ホログラフィー顕微鏡

これまで不可能であった深い内殻や電子線励起でも原子分解能ホログラフィーが測定できる新しい電子エネルギー分析器 CoDELMA を開発し、さらに電子顕微鏡と組み合わせることでナノ領域の原子分解能ホログラフィーを可能にする原子ホログラフィー顕微鏡を実現する。(A02 石川 G とも連携)



【計画:課題1】主成分分析により光電子スペクトルのピーク数を客観的に決定できる手法、ベイズ推定および逆モンテカルロ法を取り入れた構造精密化手法を新たに開発した。さらに、 SiO_2 ガラスの Å 電子回折の結果を解釈するためのリング解析手法を開発した。[28,53]

【計画:課題2】 SiO_2 ガラスのリング構造について、“真円度”と“粗さ”という新たな指標を定義しリング形状の定量評価法を確立した。 SiO_2 以外の物質にも適用可能であり、非晶質物質に潜む結晶的秩序構造を抽出し特徴づける手法になると期待される。[54]

【計画:課題3】秩序構造やリング解析が容易に行えるソフトウェア SOVA を開発した。本ソフトウェアを利用して電池材料のリング解析が行われるなど成果があがっている。また、アモルファス Si に対し熱伝導率を予測する機械学習モデルを構築し予測に寄与するリング構造を特定した。[46,65]

【公募:江草】希薄 Mg 合金において材料強化に寄与する低対称 $\text{Zn}_3\text{Mg}_3\text{Y}_8$ クラスターを発見し、電子状態計測からその形成機構まで明らかにした。[94, *Nat. Phys.* (投稿中)]

【公募:田畑】元素置換や基板の拘束により空間反転対称性の破れを導入することに成功し、電気双極子とスピンの結合によるスピン波動的電界変調が観測された。低消費論理デバイスへの応用が期待される。現在、室温スピングラスの原子分解能ホログラフィー解析の成果について論文執筆中である。[71]○

【公募:北浦】 $\text{CrNi}_{1-x}\text{O}_x$ の酸素は、 x が小さいと酸素サイトを占有し x が大きいと格子全体を乱すことが分かるとともに、空孔複合体の形成を見出すこともできた。また、蛍光体におけるドーパントと空孔からなる超秩序構造の観測や圧電結晶の圧電性を誘起する原子シフトの精密評価など成果が得られた。[96]

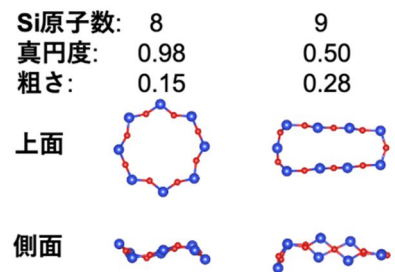
【公募:大門】高速で低ノイズの CMOS カメラを導入し計画班との連携により測定プログラムを開発することで、高いエネルギー分解能と広い測定範囲を両立できた。また、電子線鏡筒を改造することで、ナノサイズ空間分解能を実現した。Si のオージェシグナルの測定にも成功した。[76]○

(2) 各計画研究で得られた成果、及びそれぞれの計画研究と連携している公募研究で得られた成果

【計画研究を中心とした成果】 ()内は連携先の計画・公募研究 G)

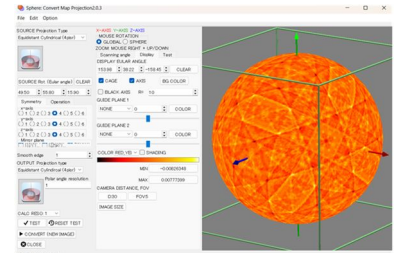
「化学結合リングの形状解析法の提案」

SiO₂ ガラスの化学結合からなるリング構造に着目し構造秩序を解析した。特に"真円度"と"粗さ"という指標を新たに定義することでリング形状の定量評価法を実現した。リングの向きを自動決定する計算法を開発し、リング周辺の原子の存在確率を計算する技術を開発した。その結果、ガラス構造においても結晶構造と同様な異方性が存在すること、ガラスに含まれる規則正しいリングの周辺において結晶と同じく高い構造秩序が形成されることを明らかにした。[54] (プレス) (A01 脇原 G、A02 小原 G)



「原子分解能ホログラフィーの計測データ解析法の高度化」

光電子ホログラフィーでは内殻準位のケミカルシフトを利用した価数選択的な構造解析が可能であるが、シフト量は非常に小さい場合が多い。そこで、主成分分析によりピーク数を客観的に決定できる新たな手法を開発した。さらに、母結晶の構造など既知情報を理論に組み込んだベイズ原子像再生理論も開発した。本手法では事前情報として原子配列モデルを与え、そのモデルパラメーターをベイズ推定および逆モンテカルロ(RMC)法により導出する。特に、アモルファス分野で使われていた RMC 法を取り入れた点は本領域ならでは成果である。専用ソフトウェア 3D-AIR-IMAGE の Python 連携機能を強化し、これらの新しい手法を利用できる環境も整えた。[47,53] (A02 石川 G)



「新しいパーシステント図「連結 PD」の提案」

トポロジカル解析で用いられるパーシステンス図の発展版として、新たに「連結パーシステンス図(連結 PD)」を提案した。この手法により、従来の PD 単体では捉えられなかった「変化」のほか、「非区間因子」と呼ばれる複雑な構造についての情報も得られるようになった。電池材料への応用で成果を上げた他、現在、ドーパント導入による構造変化に関する解析も進めている。[3] (A01 脇原 G)

【公募研究を中心とした成果】 ()内は主となる公募研究 G と連携先 G)

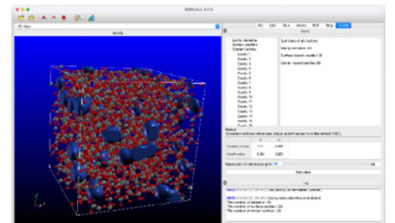
「酸素ドーブ CrN エピタキシャル膜における酸素不純物と空孔型欠陥の超秩序構造解析」

酸化化クロム(CrN_{1-x}O_x)は単純な組成にも関わらず構造が明らかになっていない。本研究では Cr、N、O 周辺の構造を光電子ホログラフィーと理論計算によって調べた。その結果、低酸素濃度(x=3%)では酸素が窒素サイトを占有し、高酸素濃度(x=33%)では格子全体が乱れコランダム構造のような異なる構造の発生が示唆された。さらに、低速陽電子ビームを用いた陽電子消滅分光によって、空孔複合体の形成を見出すこともできた。[96] (北浦 G(公募)、A01 脇原 G、A02 小原 G・石川 G)

【想定・予見していなかった新たな展開による成果】

「構造秩序解析および構造モデリングのためのソフトウェアの開発」

本領域ではランダム系の本格的な構造解析に初めて取り組むメンバーが多く参画していた。当初は個別に解析方法の説明を行う予定であったが、領域を進める中で構造の可視化、2 体相関分布や化学結合に関する統計量の導出、化学結合リング列挙、空隙の統計解析などを総合的に実施できるプラットフォームが必要であるとの認識に至った。そこで、最新の構造秩序解析法および構造モデリングを広く容易に使えるように GUI ソフトウェア SOVA を開発した。ランダム系の解析に必要な機能がすべて実装されているだけでなく、結晶のトポロジカル解析も可能であり、結晶からアモルファスを広く取り扱っている本領域だからこそ成し得た成果である。[46] (A02 小原 G)



8 当該学問分野及び関連学問分野への貢献の状況

研究領域全体を通じ、本研究領域の成果が当該学問分野や関連学問分野に与えたインパクトや波及効果などについて、「これまでの学術の体系や方向を大きく変革・転換させることを先導する」観点から、具体的かつ簡潔に記述すること(2頁以内)。なお、記述に当たっては次の点に留意すること。

- ・応募時に「既存の学問分野の枠に収まらない新興・融合領域の創成を目指すもの」、「当該学問分野の強い先端的な部分の発展・飛躍的な展開を目指すもの」のどちらを選択したか、また、どの程度達成できたかを明確にすること。
- ・研究推進の過程において、当初に想定・予見していなかった新たな展開によって得られた研究成果がある場合には、当該研究成果が当該学問分野や関連学問分野に与えたインパクトや波及効果についても記述すること。
- ・「9 研究発表の状況」に記載の研究成果との対応関係がわかるように記載すること。
- ・国際的なインパクトや波及効果、国内外での認知度についても記述すること。

1. 分野融合駆動による物性科学の進化

応募時には「**当該学問分野の強い先端的な部分の発展・飛躍的な展開を目指すもの**」を選択した。我々は、本来、結晶の欠陥と非晶質の構造・物性評価の先端的な手法、特に量子ビーム計測技術について世界随一の強い技術を有していた。「超秩序構造科学」では、それらを取り扱う「結晶コミュニティー」と「アモルファスコミュニティー」の融合により駆動された物性科学の飛躍的進化を目指している。コロナ禍の影響で対面会議に制限があった中で困難があったが、それを克服し予想以上の融合を遂げたと認識している。トポロジー解析を基盤とした Order/Disorder の不変量については、終盤の集中議論によって一つの結論に達することができた。特に、結晶から液体へ構造を変化させたときに Order と Disorder の境目を見い出せたのは大きな成果である。我々の見出した手法は、CREST・さきがけの「ゆらぎ材料」が発足したことから世の潮流に合致しており、広く物性・材料分野に波及するものである。今後、秩序・乱れの定量化についての研究が分野横断的にいっそう進んでいくことが期待される。

成功事例の一つに、圧力印加によるガラス内の秩序(結晶的配列)の導入と、それに基づくガラスの機能性を強化である。例えば、電気化学的手法により合成したアルミナ(Al_2O_3)ガラス[36]に高压を印加すると右図に示すように、より結晶的な原子配列である 5,6 配位構造が増えていく。同時に誘電率が 2 倍近く向上することも分かった。ここでは、より非対称な 5 配位構造(AlO_5)の関与が誘電率増強に影響したと考えている。(図 6 上)本知見は MOS-FET の高誘電率ゲート絶縁膜に使われるアモルファス Al_2O_3 改質に利用できる。実際、半導体パワーデバイスで実用化が期待されているダイヤモンドでは、アモルファス Al_2O_3 がその絶縁膜に用いられる。絶縁膜とダイヤモンド界面におけるキャリア輸送において、界面欠陥が性能を劣化させること分かっており、その複雑な構造を光電子ホログラフィーによって決定した。[86](図 6 下)さらに、機械学習力場を用いた大規模分子動力学シミュレーションにより、界面欠陥を低減させる方法について提言した。

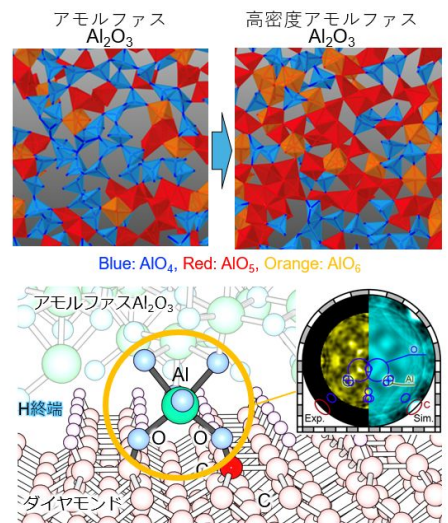


図 6 a- Al_2O_3 を核とした共同研究

このような一連の研究が成立したのは、コミュニティー融合を図るメンバーの意識の高さに由る。このような融合駆動研究はゼオライトや蓄電池研究の例もあり、従って、「**既存の学問分野の枠に収まらない新興・融合領域の創成を目指すもの**」にも図らずも該当したと言える。

2. 出版物による学問・研究成果発信

領域が進める学問や研究成果の発信、また、海外を含めた若手への啓蒙のために「超秩序構造」の構造・物性の計測技術、トポロジー解析、大規模第一原理計算や関連材料を整理した英文専門書”Hyperordered Structures in Materials –Disorder in Order and Order within Disorder-”を 2023 年 11 月に出版した。また、表 1 に示すとおり、2024 年度までに 4 つの特集号を出版しており、2025 年度にも J. Ceram. Soc. Jpn. から英語論文の特集号を出版予定である。原著論文数は、2025 年 6 月時点で 427 本である。このような活発な出版活動は国内外研究者へのアウトリーチの観点からも重要である。

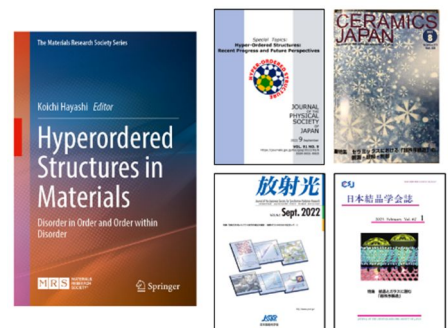


図 7 英文専門書(左)と特集号(右)

「超秩序構造科学」終了後の新しいプロジェクトの発足や分野融合に影響を与える筈である。

表1 領域で企画した特集号

2025年8月予定	J. Ceram. Soc. Jpn.	Special Issue on Hyper-Ordered Structure Science
2025年1月	日本結晶学会誌	結晶とガラスに潜む「超秩序構造」
2023年8月	Ceramics Japan	セラミックスにおける「超秩序構造」の観測・理解・制御
2022年10月	放射光	放射光を用いたガラス研究の最近の進展
2022年9月	J. Phys. Soc. Jpn.	Hyper-Ordered Structures: Recent Progress and Future Perspectives

3. 海外におけるインパクト

本領域では、「超秩序構造科学」を世界的に普及させることを目的とし、多くの国際シンポジウム・ワークショップを企画してきた。COVID-19のために2020,2021年度はオンラインで行ったが、多くの外国人研究者に参加してもらうために、国際アドバイザーの協力の下、表2に示すように対面での国際会議は全て海外で行った。ここでの交流を足掛かりにし、いくつかの国際共同研究に発展させることもできた。また、フランス・グルノーブルの材料科学研究所(SIMaP)にポスドクを置き海外領域事務局とし、近郊の欧州放射光実験施設(ESRF)で共同実験も進めた。なお、名工大はエアランゲン ニュルンベルク大学(FAU)(独)との日独大学院プログラム「エネルギー変換システム：材料からデバイスまで」(2019-28年度)を進めており、林は2024年4月から名工大代表を務めている。このプロジェクトの一部を領域メンバーにも開放することにより、FAUとの国際共同研究も増加した。国際連携や交流は、2023年度から本格的に行えるようになっており、表3に記載のとおり、多くの若手を海外大学・研究施設に派遣していることから、数年後にその成果は結実する筈である。これらの活動は、日本サイエンスのプレゼンスを大きく向上させることにも繋がっている。なお、国際共著は全体の27.5%であり、当初の目標(30%)をやや下回っているが、コロナ禍で海外渡航が制限されていた状況を考えれば、健闘した数字と考えている。

表2 海外で行った国際シンポジウム・ワークショップ

'25/1/29-31	Japan House (London)	Symposium on Hyperordered Structure Science in London
'24/7/10-13	PIMS (Saskatoon)	International Workshop on Hyperordered Structures and Quantum Materials
'23/9/24-29	IRN Aperiodic (Evian)	International Conference on Complex Orders in Condensed Matter
'23/5/22-24	HERAEUS (Bad Honnef)	Beyond Imperfections: New Structure-Property Relationships in Ceramics and Glasses
'22/9/19-21	IRN Aperiodic (Grenoble)	Exploration of Atomistic Disorder in Long-range Ordered Systems and of Order in Disordered Materials

4. 関連分野へのインパクトと他領域研究との横断研究

本領域は生体から無機材料までの広範な物質群を取り扱っており、機能創出に深く関係している原子配列の“ゆらぎ”や“ずれ”を数学的に理解するために位相幾何学も取り込んでいる。このような「超秩序構造科学」独自の特徴から、材料や物性科学との相性がよくインパクトを与えやすい。公募研究課題の募集に関しては、第一期において117名、第二期においては126名の応募があり、この事実は、我々の領域のスコープに多くの研究者が興味をもってもらえたためと考えている。

独自の手法を擁していることもあり、他領域研究と多くの共同研究に恵まれた。例えば、新学術領域研究「ミルフィーユ構造の材料科学」(2018-22)(代表：阿部英司)においては、希薄高強度Mg合金 $Mg_{99.2}Zn_{0.2}Y_{0.6}$ の蛍光X線ホログラフィー解析を行い、新たな強化機構に関する特筆すべき結果を得ている(図8)。また、「革新的光物質変換」(2017-21)(代表：沈建仁)とは、光化学系II(Photosystem II)における $CaMn_4O_5$ のイメージングに関する共同研究を続けている。[58]「ハイパーマテリアル」(2019-23)(代表：田村隆治)とは、原子分解能ホログラフィーを用いた準結晶(二次元準結晶も含む)の元素選択的構造解析

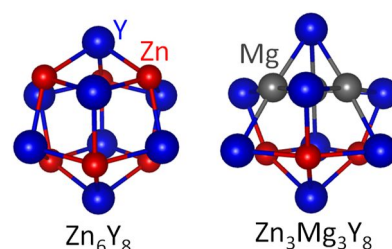


図8 合金強化に関わるクラスター

について取り組んでいる。また、研究面だけでなく、上記の国際会議“International Conference on Complex Orders in Condensed Matter”を共同開催し、さらに、そこで知り合った研究者と次年度企画“International Workshop on Hyperordered Structures and Quantum Materials”を開催することに繋がった。なお、本領域には変革領域研究(A)「データ記述科学」(2022-26)の平岡教授(京大)が研究協力者として参画しており、彼が広げたパーセントホモロジーは「超秩序構造科学」に深く浸透したと言える。このように、期間内に多くの領域間連携に取り組めた。また、多くの新学術・変革領域領域研究が集う「第17回物性科学領域横断研究会」を2023年度は名工大で開催し、領域間融合にも尽力した。

9 研究発表の状況

研究項目ごとに計画研究・公募研究の順で、本研究領域により得られた研究成果の発表の状況（主な雑誌論文、学会発表、書籍、産業財産権、ホームページ、主催シンポジウム等の状況。令和7年5月末までに掲載等が確定しているものに限る。）について、以下の留意点を踏まえ、具体的かつ簡潔に記述すること（5頁以内）。

- ・雑誌論文の記述に当たっては、新しいものから順に発表年次をさかのぼり、計画研究代表者（発表当時、以下同様。）には二重下線、計画研究分担者には一重下線、公募研究代表者には波線、corresponding author には左に*印を付すこと。
- ・領域設定期間より前の研究成果など、本研究に直接関連のない成果発表については、記入しないこと。

発表論文（全て査読有、全て謝辞入り）101篇（合計427篇）

班間の連携論文には、プレスリリース等を行った重要論文には を付した。

・研究項目 A01 <計画研究2班>

1. ☆K. A. Kirchner, S. Ogasawara, M. Jeem, H. Ohta, A. Suzuki, H. Tajiri, T. Koganezawa, L. S. R. Kumara, J. Nishii, J. C. Mauro, Y. Matsuo, and *M. Ono, “Controlling thermal conductivity of amorphous SiO_x films through structural engineering utilizing single crystal substrate surfaces”, *Nano Lett.* **25**, 7748–7753 (2025).
2. ☆*M. Ono, Y. Tanabe, M. Fujioka, H. Yamada, K. Ohara, S. Kohara, M. Fujinami, and J. Nishii, “Direct observation of the topological pruning in silica glass network; the key for realizing extreme transparency”, *NPG Asia Mater.* **17**, 5 (2025).
3. ☆*N. Kitamura, H. Matsubara, K. Kimura, I. Obayashi, Y. Onodera, K. Nakashima, H. Morita, M. Shiga, Y. Harada, C. Ishibashi, Y. Idemoto, and K. Hayashi, “Relationship between network topology and negative electrode properties in Wadsley–Roth phase TiNb₂O₇”, *NPG Asia Mater.* **16**, 62 (2024).
4. ☆N. Happo, A. Kubota, X. Yang, R. Eguchi, H. Goto, M. Ikeda, K. Kimura, Y. Takabayashi, J. R. Stellhorn, S. Hayakawa, *K. Hayashi, and Y. Kubozono, “Nanophase separation in K_{1-x}Ca_xC₈ revealed by X-ray fluorescence holography and extended X-ray absorption fine structure”, *Chem. Mater.* **36**, 4135–4143 (2024).
5. ☆*H. Taniguchi, T. Watanabe, T. Kuwano, A. Nakano, Y. Sato, M. Hagiwara, H. Yokota, and K. Deguchi, “Unconventional polarization response in titanite-type oxides due to hashed antiferroelectric domains”, *ACS Nano* **18**, 14523–14531 (2024).
6. ◎H. Inoue, *A. Masuno, M. Shiga, and Y. Watanabe, “Nearly close-packed atomic arrangements in BaTi₂O₅ glass”, *Scripta Materialia* **252**, 116271 (2024).
7. *A. Masuno, S. Munakata, Y. Okamoto, T. Yaji, Y. Kosugi, and Y. Simakawa, “Crystal-like atomic arrangement and optical properties of 25La₂O₃–75MoO₃ binary glasses composed of isolated MoO₄²⁻”, *Inorg. Chem.* **63**, 5701–5708 (2024).
8. J. Yu, K. Iyoki, S. P. Elangovan, H. Fujinuma, T. Okubo, and *T. Wakihara, “Unexpected low temperature activity with low N₂O emission of stabilized Al-rich zeolite beta for selective catalytic reduction of NO_x”, *Chem. Eur. J.* **30**, e202303177 (2024).
9. ◎M. Ikeda, H. Li, Z. Zhang, Y. Yamamoto, H. Goto, R. Eguchi, H. Ishii, Y.-F. Liao, Y. Takabayashi, K. Hayashi, and *Y. Kubozono, “Pressure dependence of superconductivity in alkaline earth metal-doped FeSe: toward completion of the phase diagram of superconducting transition temperature versus FeSe layer distance”, *Chem. Mater.* **35**, 4338–4346 (2023).
10. *J. Harada, H. Takahashi, R. Notsuka, M. Takehisa, Y. Takahashi, T. Usui, and H. Taniguchi, “Ferroelectric ionic molecular crystals with significant plasticity and a low melting point: high performance in hot-pressed polycrystalline plates and melt-grown crystalline Sheets”, *Angew. Chem. Int. Ed.* **62**, e202215286 (2023).
11. ◎S. Kakimoto, Y. Hashimoto, T. Kuwano, K. Kimura, K. Hayashi, M. Hagiwara, K. Deguchi, and *H. Taniguchi, “Controlling dielectric properties of Nb + X (X = Al, Ga, In) co-doped and Nb-doped rutile-type TiO₂ single crystals”, *J. Mater. Chem. C* **11**, 1304–1310 (2023).
12. J. J. Wiesfeld, M. Asakawa, T. Aoshima, A. Fukuoka, E.J.M. Hensen, and *K. Nakajima, “A catalytic strategy for selective production of 5-formylfuran-2-carboxylic acid and furan-2,5-dicarboxylic acid”, *ChemCatChem*, **14**, e202200191 (2022).
13. A. Minami, P. Hu, Y. Sada, H. Yamada, K. Ohara, Y. Yonezawa, Y. Sasaki, Y. Yanaba, M. Takemoto, Y. Yoshida, T. Okubo, and *T. Wakihara, “Tracking sub-nano-scale structural evolution in zeolite synthesis by in situ high-energy X-ray total scattering measurement with pair distribution function analysis”, *J. Am. Chem. Soc.* **144**, 23313–23320 (2022).
14. *N. Kitamura, K. Kimura, N. Ishida, C. Ishibashi, and Y. Idemoto, “Effects of Ca substitution on the local structure and oxide-ion behavior of layered perovskite lanthanum nickelate”, *Front. Mater.* **9**, 954729 (2022).
15. ☆T. Yoshioka, K. Iyoki, Y. Hotta, Y. Kamimura, H. Yamada, Q. Han, T. Kato, C. A. J. Fisher, Z. Liu, R. Ohnishi, Y. Yanaba, K. Ohara, Y. Sasaki, A. Endo, T. Takewaki, T. Sano, T. Okubo, and *T. Wakihara, “Dealumination of small-pore zeolites through pore-opening migration”, *Sci. Adv.* **8**, eabo3093 (2022).
16. ◎*H. Taniguchi, T. Hattori, T. Isobe, A. Nakano, I. Terasaki, and M. Hagiwara, “A large piezoelectric voltage coefficient in aluminate-sodalite-type improper ferroelectric oxides”, *J. Mater. Chem. C*, **9**, 15649–15653 (2021).
17. S. Yamaguchi, S. Fujita, K. Nakajima, S. Yamazoe, J. Yamasaki, T. Mizugaki, and *T. Mitsudome, “Air-stable and reusable nickel phosphide nanoparticle catalyst for the highly selective hydrogenation of d-glucose to d-sorbitol”, *Green Chem.* **23**, 2010–2016 (2021).
18. M. Sheng, S. Yamaguchi, A. Nakata, S. Yamazoe, K. Nakajima, J. Yamasaki, T. Mizugaki, and T. Mitsudome, “Hydrotalcite-supported cobalt phosphide nanorods as a highly active and reusable heterogeneous catalyst for ammonia-free selective hydrogenation of nitriles to primary amines”, *ACS Sustain. Chem. Eng.* **33**, 112380–11246 (2021).
19. ◎T. Taguchi, Y. Wang, X. Yang, H. Li, Y. Takabayashi, K. Hayashi, T. Miyazaki, Y.-F. Liao, H. Ishii, H. Goto, R. Eguchi, and *Y. Kubozono, “Emergence of a pressure-driven superconducting phase in Ba_{0.77}Na_{0.23}TiSb₂O”, *Inorg. Chem.* **60**, 3585–3592 (2021).
20. R. Sato, Z. Liu, C. Peng, C. Tan, P. Hu, J. Zhu, M. Takemura, Y. Yonezawa, H. Yamada, A. Endo, J. García-Martínez, T. Okubo, and *T. Wakihara, “Engineering mesopore formation in hierarchical zeolites under high hydrostatic pressure”, *Chem. Mater.* **33**, 8440–8446 (2021).
21. C.-T. Chen, K. Iyoki, P. Hu, H. Yamada, K. Ohara, S. Sukenaga, M. Ando, H. Shibata, T. Okubo, and *T. Wakihara, “Reaction Kinetics-regulated formation of short-range order in an amorphous matrix during zeolite crystallization”, *J. Am. Chem. Soc.* **143**, 10986–10997 (2021).

・研究項目 A02 <計画研究2班>

- 22☆*H. Tajiri, S. Kohara, K. Kimura, S. Halubai, H. Morimoto, N. Happo, J. R. Stello, Y. Onodera, X. Qiao, D. Urushihara, P. Hu, T. Wakihara, T. Kinoshita, and K. Hayashi, “Diffraction for element-specific analysis on local structures using a combination of X-ray fluorescence holography and anomalous X-ray scattering”, *J. Synchrotron Radiat.* **32**, 125–132 (2025).
- 23◎A. Gademawla, Y. Yamamoto, *K. Kimura, H. Sekhar, N. Happo, K. G. Webber, T. Matsushita, H. Tajiri, and K. Hayashi, “Application of x-ray fluorescence holography to a single grain in polycrystalline ferroelectric ceramics”, *Rev. Sci. Instrum.* **96**, 035107 (2025).
- 24☆D. Kyotani, S. H. Oh, S. Kitani, Y. Fujii, H. Hijiya, H. Mizuno, S. Kohara, A. Koreeda, A. Masuno, H. Kawaji, S. Kojima, Y. Yamamoto, and *T. Mori, “Relationship between the boson peak and first sharp diffraction peak in glasses”, *Sci. Rep.* **15**, 9617 (2025).
- 25☆*S. Kohara, S. Sato, M. Shiga, Y. Onodera, H. Masai, T. Wakihara, A. Masuno, A. Hirata, N. Kitamura, Y. Idemoto, K. Kimura, and K. Hayashi, “Unravelling the density-driven modification of the topology generated by the interconnection of SiO₄ tetrahedra in silica polymorphs”, *J. Ceram. Soc. Jpn.* **132**, 653–662 (2024).
- 26☆*K. Kimura, S. Tsutsui, H. Miyazaki, S. Nakagami, Y. Nishino, and K. Hayashi, “Thermal insulation enhanced by the dopant-induced phonon softening discovered in thermoelectric Heusler compounds”, *Acta Mater.* **281**, 120439 (2024).
27. *K. Kimura, S. Tsutsui, Y. Yamamoto, A. Nakano, K. Kawamura, R. Kajimoto, K. Kamazawa, A. Martin, K. G. Webber, K. Kakimoto, and K. Hayashi, “Ca-induced phonon softening in BaTiO₃ revealed by inelastic x-ray and neutron scattering”, *Phys. Rev. B* **110**, 134314 (2024).
- 28☆*A. Hirata, S. Sato, *M. Shiga, Y. Onodera, K. Kimoto, and *S. Kohara, “Direct observation of atomic density fluctuation originated from the first sharp diffraction peak in SiO₂ glass”, *NPG Asia Mater.* **16**, 25 (2024).
- 29☆*Y. Onodera, *Y. Takimoto, H. Hijiya, Q. Li, H. Tajiri, T. Ina, and S. Kohara, “Formation of zirconium oxide crystal nucleus in the initial nucleation stage in aluminosilicate glass investigated by X-ray multiscale analysis”, *NPG Asia Mater.* **16**, 22 (2024).
- 30◎*H. Masai, M. Koshimizu, H. Kawamoto, H. Setoyama, Y. Onodera, K. Ikeda, S. Maruyama, N. Haruta, T. Sato, Y. Matsumoto, C. Takahashi, and T. Mizoguchi, “Combinatorial characterization of metastable luminous silver cations”, *Sci. Rep.* **14**, 4638 (2024).
- 31◎Y. Shuseki, *S. Kohara, T. Kaneko, K. Sodeyama, Y. Onodera, C. Koyama, A. Masuno, S. Sasaki, S. Hatano, M. Shiga, I. Obayashi, Y. Hiraoka, J. T. Okada, A. Mizuno, Y. Watanabe, Y. Nakata, K. Ohara, M. Murakami, M. G. Tucker, Marshall T. McDonnell, H. Oda, and T. Ishikawa, “Atomic and electronic structure in MgO–SiO₂”, *J. Phys. Chem. A*, **128**, 716–726 (2024).
- 32☆S. Sato, M. Miyakawa, T. Taniguchi, Y. Onodera, K. Ohara, K. Ikeda, N. Kitamura, Y. Idemoto, and *S. Kohara, “Synthesis of hyperordered permanently densified silica glasses by hot compression above the glass transition temperature”, *J. Ceram. Soc. Jpn.* **132**, 427 (2024).
- 33☆*A. Nagaoka, K. Kimura, A. K. R. Ang, Y. Takabayashi, K. Yoshino, Q. Sun, B. Dou, S.-H. Wei, K. Hayashi, and K. Nishioka, “Direct observation of group-V dopant substitutional defect in CdTe single crystals”, *J. Am. Chem. Soc.* **145**, 9191–9197 (2023).
- 34◎*H. Masai, S. Kohara, T. Wakihara, Y. Shibasaki, Y. Onodera, A. Masuno, S. Sukenaga, K. Ohara, Y. Sakai, J. Haines, C. Levelut, P. Hébert, A. Isambert, D. A. Keen, and M. Azuma, “Siliceous zeolite-derived topology of amorphous silica”, *Commun. Chem.* **6**, 269 (2023).
- 35☆R. Horie, T. Matsushita, S. Kawamura, T. Hase, K. Horigane, H. Momono, S. Takeuchi, M. Tanaka, H. Tomita, Y. Hashimoto, K. Kobayashi, Y. Haruyama, *H. Daimon, Y. Morikawa, M. Taguchi, and J. Akimitsu, “Origin of unexpected Ir³⁺ in a superconducting candidate Sr₂IrO₄ system analyzed by photoelectron holography”, *Inorg. Chem.* **62**, 10897–10904 (2023).
36. *H. Hashimoto, Y. Onodera, S. Tahara, *S. Kohara, K. Yazawa, H. Segawa, M. Murakami, and K. Ohara, “Structure of alumina glass”, *Sci. Rep.* **12**, 516 (2022).
- 37☆Y. Yamamoto, K. Kawamura, H. Sugimoto, A. Gademawla, *K. Kimura, N. Happo, H. Tajiri, K. G. Webber, K. Kakimoto, and K. Hayashi, “Significant displacement of calcium and barium ions in ferroelectric (Ba_{0.9}Ca_{0.1})TiO₃ revealed by x-ray fluorescence holography”, *Appl. Phys. Lett.* **120**, 52905 (2022).
- 38◎*H. Kizaki, *K. Hayashi, C. Lu, N. Happo, S. Hosokawa, S. Hidaka, S. Hayashi, M. Suzuki, and N. Uchitomi, “Anomalous atomic fluctuations in the local structure around Mn of (Zn,Sn,Mn)As₂ thin films”, *Phys. Rev. B* **106**, 64434 (2022).
- 39◎A. Suzuki, M. Ikeda, H. Ishii, Y.-F. Liao, Y. Takabayashi, K. Hayashi, H. Goto, R. Eguchi, and *Y. Kubozono, “Superconducting properties of Pd_{1-x}Pt_xBi₂ over a wide pressure range”, *J. Phys. Chem. C* **126**, 9948–9955 (2022).
- 40☆M. Fukumoto, *Y. Hirose, B. A. D. Williamson, S. Nakao, K. Kimura, K. Hayashi, Y. Sugisawa, D. Sekiba, D. O. Scanlon, and T. Hasegawa, “Ligand field-induced exotic dopant for infrared transparent electrode: W in rutile SnO₂”, *Adv. Funct. Mater.* **32**, 2110832 (2022).
- 41◎Y. J. Li, Z. X. Sun, N. Kataoka, T. Setoguchi, Y. Hashimoto, S. Takeuchi, S. Koga, T. Muro, S. Demura, K. Noguchi, H. Sakata, T. Matsushita, I. Kawasaki, S. Fujimori, T. Wakita, Y. Muraoka, and *T. Yokoya, “Incorporation site and valence state of Sn atoms in Sn-substituted La(O, F)BiS₂ superconductor”, *J. Phys. Soc. Jpn.* **91**, 54602 (2022).
42. *T. Ishikawa, P. -F. Paradis, and C. Koyama, “Thermophysical property measurements of refractory oxide melts with the electrostatic levitation furnace in the ISS”, *Front. Mater.* **9**, 954126 (2022).
- 43◎Y. Li, Z. Sun, N. Kataoka, T. Setoguchi, Y. Hashimoto, S. Takeuchi, S. Koga, T. Muro, S. Demura, K. Noguchi, H. Sakata, T. Matsushita, I. Kawasaki, S. Fujimori, T. Wakita, Y. Muraoka, and *T. Yokoya, “Incorporation site and valence state of Sn atoms in Sn-substituted La(O,F)BiS₂ superconductor”, *J. Phys. Soc. Jpn.* **91**, 054602 (2022).
- 44◎*S. Kohara, M. Shiga, Y. Onodera, H. Masai, A. Hirata, M. Murakami, T. Morishita, K. Kimura, and K. Hayashi, “Relationship between diffraction peak, network topology, and amorphous-forming ability in silicon and silica”, *Sci. Rep.* **11**, 22180 (2021).
- 45☆Y. Onodera, *S. Kohara, *P. S. Salmon, A. Hirata, N. Nishiyama, S. Kitani, A. Zeidler, M. Shiga, A. Masuno, H. Inoue, S. Tahara, A. Polidori, H.E. Fischer, T. Mori, S. Kojima, H. Kawaji, A.I. Kolesnikov, M.B. Stone, M.G. Tucker, M. T. McDonnell, A. C. Hannon, Y. Hiraoka, I. Obayashi, T. Nakamura, J. Akola, Y. Fujii, K. Ohara, T. Taniguchi, and O. Sakata, “Structure and properties of densified silica glass: Characterizing the order within disorder”, *NPG Asia Mater.* **12**, 85 (2020).

・研究項目 A03 <計画研究2班>

46. SOVA: <https://www.shiga-lab.org/sova>
47. 3D-Air-Image: <https://sites.google.com/hyperordered.org/3d-air-image/home>
- 48◎S. Yamaguchi, P. Hu, H. Ya, P. Xiao, *A. Nakata, T. Miyazaki, Y. Morikawa, J. N. Kondo, K. Tange, K. Tonokura, M. Takemoto, Y. Yonezawa, T. Yokoi, K. Iyoki, T. Okubo, and *T. Wakihara, “Adsorption behavior of low-concentration nitrous oxide on natural mordenite zeolite”, *Microporous and Mesoporous Mater.* **388**, 113550 (2025).
49. S. Li, T. Miyazaki, and *A. Nakata, “Theoretical search of characteristic atoms in supported gold nanoparticles - a large-scale DFT study -”, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **26**, 20251–20260 (2024).
50. *A. Tanaka, A. Saito, T. Murata, A. Nakata, and *T. Miyazaki, “Large-scale DFT calculations of multi-component glass systems (SiO₂)_{0.70}(Al₂O₃)_{0.13}(XO)_{0.17} (X = Mg, Ca, Sr, Ba): Accuracy of classical force fields”, *J. Non-Cryst. Solids* **625**, 122714 (2024).
51. Y. Tsai, Y. Hashimoto, Z. X. Sun, T. Moriki, T. Tadamura, T. Nagata, P. Mazzolini, A. Parisini, M. Bosi, L. Seravalli, T. Matsushita, and *Y. Yamashita, “Photoelectron holographic study for atomic site occupancy for Si dopants in Si-doped κ-Ga₂O₃(001)”, *Nano Lett.* **24**, 3978 (2024).
52. *Y. Takano, H. X. Kondo, and H. Nakamura, “Quantitative evaluation of noncovalent interactions with negative fragmentation approach including basis set superposition error correction”, *Bull. Chem. Soc. Jpn* **97**, uoae091 (2024).
- 53◎*T. Matsushita, Y. Hashimoto, H. Tomita, Z. Sun, S. Kawamura, M. N. Fujii, and J. Mizuno, “An algorithm to correct the sensitivity distribution of a retarding field analyzer for photoelectron holography”, *e-J. Surf. Sci. Nanotechnol.* **21**, 027 (2023).
- 54☆M. Shiga, A. Hirata, Y. Onodera, and H. Masai, “Ring-originated anisotropy of local structural ordering in amorphous and crystalline silicon dioxide”, *Commun. Mater.* **4**, 91 (2023).
- 55◎*P. S. Salmon, A. Zeidler, M. Shiga, Y. Onodera, and S. Kohara, “Ring compaction as a mechanism of densification in amorphous silica”, *Phys. Rev. B* **107**, 144203 (2023).
- 56◎*T. Matsushita, Y. Hashimoto, H. Tomita, Z. Sun, S. Kawamura, M. N. Fujii, and J. Mizuno, “An algorithm to correct the sensitivity distribution of a retarding field analyzer for photoelectron holography”, *e-J. Surf. Sci. Nanotechnol.* 2023–027, (2023).
- 57◎*K. Hayashi, S. Kawamura, Y. Hashimoto, N. Akao, Z. Huang, W. Saito, K. Tasaki, K. Hayashi, T. Matsushita, and Y. Miyazaki, “Effects of oxygen on lattice defects in single-crystalline Mg₂Si thermoelectrics”, *Nanomaterials*, **13**, 1222 (2023)
- 58◎*A. K. R. Ang, Y. Umena, A. Sato-Tomita, N. Shibayama, N. Happo, R. Marumi, Y. Yamamoto, K. Kimura, N. Kawamura, Y. Takano, T. Matsushita, Y. C. Sasaki, J.-R. Shen, and K. Hayashi, “Development of serial X-ray fluorescence holography for radiation-sensitive protein crystals”, *J. Synchrotron Rad.* **30**, 368–378 (2023).
59. H. Fujikawa, H. X. Kondo, and Y. Kanematsu, *Y. Takano, “Random forest classifier of heme proteins using porphyrin distortions and axial ligands of heme”, *Chem. Lett.*, **52**, 503 (2023).
- 60◎*T. Nakayoshi, Y. Ohnishi, H. Tanaka, G. Kurisu, H. X. Kondo, and *Y. Takano, “Effects of active-center reduction of plant-type ferredoxin on its structure and dynamics: computational analysis using molecular dynamics simulations”, *Int. J. Mol. Sci.* **23**, 15913 (2022).
- 61◎H. Ishikawa, S. Yamaguchi, A. Nakata, K. Nakajima, S. Yamazoe, J. Yamasaki, T. Mizugaki, and *T. Mitsudome, “Phosphorus-alloying as a powerful method for designing highly active and durable metal nanoparticle catalysts for the deoxygenation of sulfoxides: ligand and ensemble effects of phosphorus”, *JACS Au*, **2**, 419–427 (2022).
- 62☆*Y. Kanematsu, A. Narita, T. Oda, R. Koike, M. Ota, Y. Takano, K. Moritsugu, I. Fujiwara, K. Tanaka, H. Komatsu, T. Nagae, N. Watanabe, M. Iwasa, *Y. Maéda, and *S. Takeda, “Structures and mechanisms of actin ATP hydrolysis”, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **119**, e2122641119 (2022).
63. K. Takeyasu, Y. Sawaki, T. Imabayashi, S.E.M. Putra, H.H. Halim, J. Quan, Y. Hamamoto, I. Hamada, Y. Morikawa, T. Kondo, T. Fujitani, and *J. Nakamura, “Hydrogenation of formate species using atomic hydrogen on a Cu(111) model catalyst”, *J. Am. Chem. Soc.* **144**, 12158–12166 (2022).
- 64◎S. Takeuchi, Y. Hashimoto, H. Daimon, and *T. Matsushita, “High-precision atomic image reconstruction from photoelectron hologram of O on W(110) by SPEA-L1”, *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **256**, 147177 (2022).
- 65☆*E. Minamitani, T. Shiga, M. Kashiwagi, and I. Obayashi, “Topological descriptor of thermal conductivity in amorphous Si”, *J. Chem. Phys.* **156**, 244502 (2022).
- 66◎*S. Hosokawa, N. Happo, K. Hayashi, T. Matsushita, and A. Yamashita, “Three-dimensional atomic image of FeSe high-temperature superconductor by x-ray fluorescence holography”, *e-J. Surf. Sci. Nanotechnol.* **20**, 36–41 (2022).
- 67◎*A. S.-Tomita, A. K. R. Ang, K. Kimura, R. Marumi, N. Happo, T. Matsushita, S.-Y. Park, N. Shibayama, Y. C. Sasaki, and *K. Hayashi, “X-ray fluorescence holography of biological metal sites: Application to myoglobin”, *Biochem. Biophys. Res. Commun.* **635**, 277–282 (2022).
- 68☆J. Hyodo, K. Tsujikawa, M. Shiga, Y. Okuyama, and *Y. Yamanishi, “Accelerated discovery of proton-conducting perovskite oxide by capturing physicochemical fundamentals of hydration”, *ACS Energy Lett.* **6**, 2985–2992 (2021).
69. T. Nomura, T. Kimura, Y. Kanematsu, D. Yamada, K. Yamashita, K. Hirata, G. Ueno, H. Murakami, T. Hisano, R. Yamagiwa, H. Takeda, C. Gopalasingam, R. Kousaka, S. Yanagisawa, O. Shoji, T. Kumasaka, M. Yamamoto, Y. Takano, H. Sugimoto, *T. Toshi, *M. Kubo, and *Y. Shiro, “Short-lived intermediate in N₂O generation by P450 NO reductase captured by time-resolved IR spectroscopy and XFEL crystallography”, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, **118**, e2101481118 (2021).

・ <公募研究30班>

- 70◎S. Aso, *H. Matsuo, Y. Yoneda, D. Morikawa, K. Tsuda, K. Ohoyama, T. Ishigaki, and Y. Noguchi, “Crystal structures and phase stability of antiferroelectric R phases in undoped and Ca-modified sodium niobates”, *Phys. Rev. B* **111**, 174114 (2025).
71. EMK I. Ahamed, H. Yamahara, Md S. Sarker, H. Li, K. Morikawa, K. Yamagami, M. Kobayashi, M. Seki, and *H. Tabata, “Strain-induced reduction of centrosymmetry in rare-earth iron garnet thin films”, *Adv. Electron. Mater.* 2400735 (2025).
- 72☆Y. Isoda, *T. N. Pham, R. Aso, S. Nakamizo, T. Majima, S. Hosokawa, K. Nitta, Y. Morikawa, Y. Shimakawa, and *D. Kan, “Stabilization of oxygen vacancy ordering and electrochemical-proton-insertion-and-extraction-induced large resistance modulation in strontium iron cobalt oxides Sr(Fe,Co)O_y”, *Nat. Commun.* **16**, 56 (2025).

73. *M. Matsuda, Y. Himeno, K. Shida, M. Matsuda, M. Mitsuhashi, and Y. Nakajima, "Periodic oxygen-defective ZrO_{2-x} films with room-temperature ferromagnetism produced by precisely controlling oxidation of metallic Zr foil" *Scr. Mater.* **242**, 115944 (2024).
74. ©M. Kawasaki, T. Kuwano, H. Taniguchi, S. Fujihara, and *M. Hagiwara, "Effect of Al-Nb codoping on dielectric properties and breakdown strength of rutile TiO_2 ceramics" *J. Ceram. Soc. Jpn.* **132**, 304 (2024).
75. ☆*Y. Yakiyama, M. Li, D. Zhou, T. Abe, C. Sato, T. Akutagawa, T. Matsumura, N. Matubayasi, and H. Sakurai, "Biased bowl-direction of monofluorosumanene in the solid state", *J. Am. Chem. Soc.* **146**, 5224–5231 (2024).
76. H. Daimon and S. Matsushima, "Cubic coil system composed of three sets of cubic triple coils to produce wide area 0.66% uniform magnetic field in any direction", *Rev. Sci. Instrum.* **95**, 074704 (2024).
77. ©*S. Nakashima, K. Kimura, N. Happo, A. K. R. Ang, Y. Yamamoto, H. Sekhar, A. I. Osaka, K. Hayashi, and H. Fujisawa, "Intermediate multidomain state in single-crystalline Mn-doped $BiFeO_3$ Thin films during ferroelectric polarization switching", *Sci. Rep.* **14**, 14358 (2024).
78. ©T. Inoue, T. Ina, H. Masai, N. Kondo, F. Matsui, T. Kinoshita, and *A. Nakajima, "Extended X-ray absorption fine structure (EXAFS) measurements on alkali metal superatoms of Ta-atom encapsulating Si_{16} Cage", *J. Phys. Chem. Lett.* **15**, 5376–5381 (2024).
79. ©R. Otsuka, K. Shimizu, H. Wakabayashi, and *S. Watanabe, "Investigating the atomic structures and electronic properties of WS₂ thin films with sulfur vacancies via a neural network potential-aided first-principles study", *Appl. Phys. Express* **17**, 115501 (2024).
80. *N. Katayama and K. Kojima, "Molecular formation and precursory local distortion in layered LiX_2 ($X=O, S, Se$)", *J. Phys. Soc. Jpn.* **93**, 111004 (2024).
81. ☆*T. Ohkubo, S. Sasaki, A. Masuno, and E. Tsuchida, "Ab initio molecular dynamics study of trivalent rare earth rich borate glasses: Structural insights and formation mechanisms", *J. Phys. Chem. B* **128**, 11800–11813 (2024).
82. ☆K. Yamakawa, H. Nakada, K. Kimura, K. Oikawa, M. Harada, Y. Inamura, K. Ohoyama, and *K. Hayashi, "Atomic imaging of $BaTiO_3$ by multiple-wavelength neutron holography", *J. Phys. Soc. Jpn.* **93**, 104601 (2024).
83. ©*S. Arai, R. Kobayashi, M. Adachi, K. Kimura, and H. Masai, "Possibility of two-dimensional ordering of cryptochrome 4a from European robin", *Biochem. Biophys. Res. Commun.* **737**, 150513 (2024).
84. ☆M. Namba, *H. Takatsu, R. Mikita, Y. Sijia, K. Murayama, H.-B. Li, R. Terada, M. Ochi, R. S. Puche, E. Palacios, N. Ishimatsu, D. Shiga, H. Kumigashira, K. Kinjo, S. Kitagawa, K. Ishida, T. Terashima, K. Fujita, T. Mashiko, K. Yanagisawa, K. Kimoto, and *H. Kageyama, "Large perpendicular magnetic anisotropy induced by an intersite charge transfer in strained $EuVO_2$ H films", *J. Am. Chem. Soc.* **145**, 21807 (2023).
85. ☆*F. Kishimoto, T. Yoshioka, R. Ishibashi, H. Yamada, K. Muraoka, H. Taniguchi, T. Wakihara, and K. Takanebe, "Direct microwave energy input on a single cation for outstanding selective catalysis", *Sci. Adv.* **9**, eadi1744 (2023).
86. ☆*M. N. Fujii, M. Tanaka, T. Tsuno, Y. Hashimoto, H. Tomita, S. Takeuchi, S. Koga, Z. Sun, J. I. Enriquez, Y. Morikawa, J. Mizuno, M. Uenuma, Y. Uraoka, and *T. Matsushita, "Atomic imaging of interface defects in an insulating film on diamond", *Nano Lett.* **23**, 1189–1194 (2023).
87. ☆T. Inoue, M. Hatanaka, and *A. Nakajima, "Oxidative activation of small aluminum nanoclusters with boron atom substitution prior to completing the endohedral $B@Al_{12}$ superatom", *J. Am. Chem. Soc.* **145**, 23088–23097 (2023).
88. A. Kutana, Y. Shimano, and R. Asahi, "Permittivity boosting by induced strain from local doping in titanates from first principles", *Sci. Rep.*, **13**, 3761 (2023).
89. H. Murashige, Y. Hiejima, Y. Sanada, and *A. Chiba, "In situ X-ray and infrared measurements of alkane absorption and desorption processes of isotactic poly(4-methyl-1-pentene) film", *Macromolecular Symposia*, **408**, 2200090 (2023).
90. K. Hasegawa, *T. Shimizu, T. Ohsawa, I. Sakaguchi, and N. Ohashi, "Full polarization reversal at room temperature in unsubstituted AlN", *Appl. Phys. Lett.* **123**, 192903 (2023).
91. ☆*S. Hosokawa, K. Kobayashi, A. Koura, F. Shimojo, Y. Tezuka, J. Adachi, Y. Onodera, S. Kohara, H. Tajiri, A. Chokkalingam, and T. Wakihara, "Atomic and electronic structures of an Ag-containing 4A zeolite", *Microporous Mesoporous Mater.* **359**, 112662 (2023).
92. Ueda, N. Ikenaga, Y. Horita, Y. Takagaki, F. Nishiyama, M. Yukimune, F. Ishikawa, and *Y. Tominaga, "Structural evaluation of $GaAs_{1-x}Bi_x$ obtained by solid-phase epitaxial growth of amorphous $GaAs_{1-x}Bi_x$ thin films deposited on (001) GaAs substrates", *J. Cryst. Growth* **601**, 126945 (2023).
93. ©K. Tashiro, *M. Kobayashi, K. Nakajima, and T. Taketsugu, "Computational survey of humin formation from 5-(hydroxymethyl)furfural under basic conditions" *RSC Adv.* **13**, 16293 (2023).
94. ©*K. Kimura, D. Egusa, K. Hagihara, N. Happo, N. Kawamura, H. Tajiri, K. Hayashi, and E. Abe, "Local structural analysis around solute-element in annealed $Mg_{99.2}Zn_{0.2}Y_{0.6}$ alloy using x-ray fluorescence holography", *Mater. Trans.* **64**, 750–755 (2023).
95. ©*P. R. Varadwaj, V. A. Dinh, Y. Morikawa, and *R. Asahi, "Polymorphs of titanium dioxide: An assessment of the variants of projector augmented wave potential of titanium on their geometric and dielectric properties", *ACS Omega* **8**, 22003–22017 (2023).
96. ©*M. Kitaura, S. Watanabe, H. Masai, T. Ina, H. Setoyama, M. Ishizaki, T. Nakanishi, Y. Matsushima, T. Kunimoto, and A. Ohnishi, "Valence and local structure analyses of Eu and Dy ions in $Sr_2MgSi_2O_7$: Eu, Dy long persistent phosphorescence phosphors synthesized by solid state reaction", *Chem. Lett.* **52**, 190–193 (2023).
97. ☆M. Shibuta, T. Inoue, T. Kamoshida, T. Eguchi, and *A. Nakajima, " Al_{13}^- and $B@Al_{12}^-$ superatoms on a molecularly decorated substrate", *Nat. Commun.* **13**, 133 (2022).
98. ©*M. Uenuma, S. Kuwaharada, H. Tomita, M. Tanaka, Z. Sun, Y. Hashimoto, M. N. Fujii, T. Matsushita, Y. Uraoka, "Atomic structure analysis of gallium oxide at the Al_2O_3 /GaN interface using photoelectron holography", *Appl. Phys. Exp.* **15**, 085501 (2022).
99. Y. Matsuo, Y. Matsukawa, M. Kitakado, G. Hasegawa, S. Yoshida, R. Kubonaka, Y. Yoshida, T. Kawasaki, E. Kobayashi, C. Moriyoshi, S. Ohno, K. Fujita, K. Hayashi, and *H. Akamatsu, "Topochemical synthesis of $LiCoF_3$ with a high-temperature $LiNbO_3$ -type structure", *Inorg. Chem.* **61**, 11746–11756 (2022).
100. K. Shimizu, Y. Dou, E. F. Arguelles, T. Moriya, E. Minamitani, and *S. Watanabe, "Using neural network potentials to study defect formation and phonon properties of nitrogen vacancies with multiple charge states in GaN" *Phys. Rev. B* **106**, 054108 (2022).
101. ☆*N. Ishimatsu, S. Iwasaki, M. Kousa, S. Kato, N. Nakajima, N. Kitamura, N. Kawamura, M. Mizumaki, and S. Kakizawa, "Elongation of Fe-Fe atomic pairs in the Invar alloy $Fe_{65}Ni_{35}$ ", *Phys. Rev. B* **103**, L220102 (2021).

総説・解説9編(合計86篇)

1. ©H. Daimon, T. Matsushita, F. Matsui, K. Hayashi, Y. Wakabayashi, “Recent advances in atomic resolution three-dimensional holography”, *Adv. Phys.: X*, 2350161 (2024).
2. ©林好一ほか, “セラミックスにおける「超秩序構造」の観測・理解・制御”, *Ceramics Japan* **58**, 502–550 (2023). (領域研究者らによる特集号)
3. ©K. A. Kirchner, D. R. Cassar, E. D. Zanutto, M. Ono, S. H. Kim, K. Doss, M. L. Bødker, M. M. Smedskjaer, S. Kohara, L. Tang, M. Bauchy, C. J. Wilkinson, Y. Yang, R. S. Welch, M. Mancini, and *J. C. Mauro, “Beyond the average: spatial and temporal fluctuations in oxide glass-forming systems”, *Chem. Rev.* **123**, 1774–1840 (2022).
4. ©K. Hayashi, S. Kohara, H. Taniguchi, and A. Nakata (Editors), “Hyper-Ordered Structures: Recent Progress and Future Perspectives”, *J. Phys. Soc. Jpn.* **91**, 091001–091013 (2022). (領域研究者らによる特集号)
5. *Y. Takano, H. X. Kondo, and H. Nakamura, “Quantum chemical studies on hydrogen bonds in helical secondary structures”, *Biophys. Rev.* **14**, 1369–1378 (2022).
6. *I. Obayashi, T. Nakamura, and Y. Hiraoka, “Persistent homology analysis for materials research and persistent homology software: HomCloud”, *J. Phys. Soc. Jpn.* **91**, 091013 (2022). (JPSJにおける2023年度引用数top10)
7. 北村尚斗, “全散乱データを用いた逆モンテカルロ法による正極ナノ粒子の原子配列解析”, *Ceramics Japan* **56**, 359 (2021).
8. ©K. Ohara, Y. Onodera, M. Murakami, S. Kohara, “Structure of disordered materials under ambient to extreme conditions revealed by synchrotron x-ray diffraction techniques at SPring-8—recent instrumentation and synergic collaboration with modelling and topological analyses”, *J. Phys. Condens. Matter* **33**, 383001 (2021).
9. ©K. Hayashi and T. Matsushita, “Recent achievements using X-ray fluorescence holography and photoelectron holography”, SPring-8/SACLA Research Frontier 2020, 12 (2021).

書籍4編(合計14篇)

1. K. Hayashi (Editor), “Hyperordered Structures in Materials”, Springer Singapore, (2023).
2. 池 祐一, E.G. エスカラ, 大林一平, 鍛冶静雄, “位相的データ解析から構造発見へ: パーシステントホモロジーを中心に”, サイエンス社, (2023).
3. D. Padovan, E.J. M. Hensen, and K. Nakajima, “Crystalline Metal Oxide Catalysts (1st edition), Chapter 11, Metal Oxide Catalysts for the Valorization of Biomass-Derived Sugars”, Springer (2022).
4. S. Kohara and L. Pusztai, Atomistic Simulations of Glasses: Fundamentals and Applications, ed. by J. Du and A. N. Cormack, Wiley-American Ceramic Society (2022) 60–88.

国際会議講演(招待講演のみ)10件(合計389件)

1. “Optical control of dielectric permittivity in widegap aluminates”, H. Taniguchi, Electroceramics XIX, Vilnius, Lithuania, 2024年8月19日
2. “Void-engineering in silica glass for ultralow optical scattering loss”, M. Ono, 2022 European Conference on Optical Communication (ECOC 2022) workshop, Basel, Switzerland. 2022年9月18日
3. “Structure of densified silica glass”, Y. Onodera, 15th International Conference on the Structure of Non-Crystalline Materials (NCM15), Cambridge, 2024年7月15日
4. “The electrostatic levitation furnace onboard the international space station for container-less material processing and thermophysical property measurements at extremely high temperature”, T. Ishikawa, The electrochemical society 243rd meeting, Boston, 2023年5月29日
5. “Large-scale DFT calculations for nanoarchitectonics”, A. Nakata, APS March Meeting 2024, Minneapolis, USA, 2024年3月5日
6. “Theoretical study on the dry reforming of methane”, Y. Morikawa, 6th International Conference on Catalysis and Chemical Engineering, San Francisco, 2022年2月25日
7. Dielectric Properties of Doped Metal Oxides Studied with Machine Learning, Ryoji Asahi, ASIAN-25, Ulsan, Korea, 2024.10.28.
8. “Local structures of Tm ions in Ca₂Al₂SiO₇:Eu,Tm long persistent phosphorescence phosphor studied by X-ray fluorescence holography and positron annihilation lifetime spectroscopy”, M. Kitaura, 9th International Symposium on Optical Materials, Tarragona, Spain, 2023年6月28日
9. “Oxidation reactivities of two Ta@Si₁₆ and B@Al₁₂ superatoms on an organic substrate”, A. Nakajima, Symposium on Size Selected Cluster, Davos, Switzerland, 2023年2月28日
10. “Structures and properties of stimuli-responsive molecular crystals composed of unique-shaped building units”, Y. Yakiyama, Singapore International Chemistry Conference, Singapore, 2022年12月14日

主催シンポジウム・ワークショップ 6件(合計21件) *表2(前掲)、表4(後掲)にも記載

1. “Symposium on Hyper-Ordered Structure Sciences in London”, 2025年1月(ロンドン)
2. 日本物理学会第79回年次大会企画シンポジウム「超秩序構造が拓く材料科学~"Disorder in Order"と"Order within Disorder"の物理~」2024年9月(北海道大学)
3. “Japan-Italy joint workshop - Workshop on physics and electronics of 2D doped materials”, 2024年6月(蓼科)
4. 第17回物性科学領域横断研究会、2023年11月(名古屋工業大学)
5. 第70回応用物理学会春季学術講演会シンポジウム「物質の超秩序構造とその応用 ~ 結晶と非晶質のはざまの科学~」2023年3月(上智大学)
6. 第35回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム「放射光を用いたガラス研究の最前線と未来」2022年1月9日(オンライン)

産業財産権 1件(合計4件)

1. 特願 2025-034763 (2025/03/05)、「希土類酸化物強磁性体、希土類酸化物強磁性体の製造方法」国立大学法人熊本大学、松田光弘 他

10 審査結果の所見及び中間評価結果の所見で指摘を受けた事項への対応状況

研究領域全体を通じ、審査結果の所見及び中間評価結果の所見において指摘を受けた事項があった場合には、当該指摘及びその対応状況等について、具体的かつ簡潔に記述すること(2頁以内)。

(審査結果の所見において指摘を受けた事項への対応状況)

「審査結果の所見」

プロジェクトの目標でもある、「超秩序構造」のコンセプトに基づいた学理構築や材料創製などの領域研究推進について、「その実効性については必ずしも明確でなく、また、各計画研究の具体的内容が領域代表者の上記方針に十分に沿ったものであるのかどうかについてやや不安があり、コンセプトの深化と適切な研究領域運営が求められる。」

【回答】「超秩序構造」とは完全規則性、完全無秩序からの構造的な“ずれ”、物質に機能性を付与する中間相である。このコンセプトの理解と連携研究の促進を徹底するために、領域開始時より計画及び公募班の代表者には「3ヶ月毎の報告書」の提出を義務付け、総括班会議において厳密にチェックし、適宜、指導も行ってきた。これに加え、「超秩序構造科学」の概念や成果を広く世界に普及させるために、領域の英文専門書”Hyperordered Structures in Materials”を、公募班も含めた総勢25名のメンバーによって執筆し、2023年11月に出版した。その他、4つの特集号を多くのメンバーと作成しており、これらの活動を通じてコンセプトの理解は領域内に浸透したと確信している。

「留意事項」

計画研究A01(脇原)で述べられている「ライブラリー」の領域内における位置付けが明確ではない。

【回答】我々が掲げている「ライブラリー」とは、領域で取り扱う材料の構造・物性情報をデータベースとして集約し、実試料との紐づけ(ライブラリーの構築)させることを指す。試料の物性データに加え、SPRING-8やJ-PARCで計測したホログラムやX線・中性子散乱データをデータベースに登録し、その情報を元にした原子配列や電子状態やパーシステント図も同時に一元管理する。各試料にQRコードを付与することで、容易に目的データにアクセス可能である。また、実験データだけでなく、関連化合物のシミュレーション結果も集約し、各種データの系統的な解釈を加速し、超秩序構造物質の出口を見据えた活動を推進できる。サイトは既に公開済みで、現在は蓄電池の活物質のデータを充実させており、トポロジカル解析も用いた性能予測への利用に取り組んでいる。

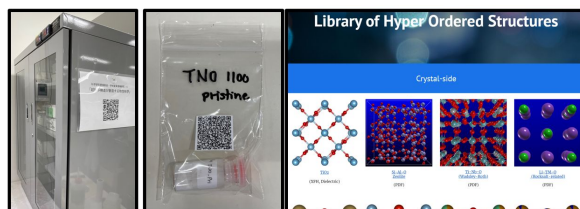


図9 領域ライブラリー. 左より試料保管庫、試料とバーコード、データ管理ウェブサイト

社会実装を計画に含めていることは本領域のスコープを超えているように感じられ、領域の共通学理の構築にどのように歩調が合わせられていくのかについては、更なる説明が必要である。社会実装の部分は、他のプロジェクトに展開させる方針でも良いと思われる。

【回答】ライブラリーの活用や領域で考案された材料合成法を、企業の製造プロセスにフィードバックさせることを目標としている。ゼオライトや蓄電池電極材料において、既に企業と社会実装に近い取り組みを行っているメンバーも居るが、モデルケース的な位置づけと考えている。指摘にあるように、本格的な社会実装については、別プロジェクトにおいて進める方が適していると考えられる。

「参考意見」

対象とする物質が広範に及びすぎており、ある程度絞り込む戦略の方が成果に繋がりやすいのではという意見が複数挙がった。

【回答】物質が広範に及ぶことは指摘の通りであるが、酸化物ガラスや酸化チタン(結晶)など、絞りこんだ重点的な研究対象はある。実際のそれらの材料を中心とした研究の広がりがあった。一方、Order/Disorderの不変量に関する取り組みにおいては、普遍的に適用できるものである必要があるため、有機分子やタンパク質などの物質も含んでいる方が不変量の有効性を評価しやすい。但し、ヒアリングの際に触れた蓄電池の電解液等については、研究対象としていない。

不純物を含む結晶から超格子、アモルファス、ガラスなど非晶質を統括して理解するための普遍的な学理・概念を明確化すべきではないか。

【回答】指摘されている普遍的な学理・概念の明確化については、下記に示す、トポロジカル解析の中から不変量を見い出す作業によって、結晶とガラスの局所構造を同じ土俵で議論することを試みている。下記に示しているように、この点については集中的な議論によって、ある結論に達している。

X線や電子線散乱の研究を中心に据えているが、規則構造を持たない非晶系の研究には、ダイナミクスや非平衡の実験研究グループが必要とされる。

【回答】非晶質に関わるダイナミクス及び非平衡の研究については、公募班に細川伸也 教授(熊本大)や千葉文野 講師(慶応大)が加わっている。また、テラヘルツ光によるダイナミクスの研究を進めている森龍也 助教(筑波大)に協力研究員としてメンバーに加わってもらった。なお、本コメントに対応すべく、J-PARCの長期利用に課題申請を行い、中性子散乱及び非弾性散乱のビームタイムを長期的に獲得した。この指摘に取り組むことによって、最終年度にガラスの秩序構造とボゾンピークの相関性[35]やTiO₂におけるNb周辺のポーラロンと誘電率増強の解明[12]、添加元素によるフォノンバンド変調の発見[25,26]など、特筆すべき成果が複数上がった。特に最後の研究は、領域代表者の科研費 基盤(A)に繋がった。

(中間評価結果の所見において指摘を受けた事項への対応状況)

「評価結果の所見」

「超秩序構造」の学理構築に向けて、研究対象とする全ての有機・無機材料中にある、多種多様な「超秩序構造」を貫き、普遍的な議論・理解を可能とする概念や不変量(記述子)を明確にすることが望まれる。さらに、創出された普遍的な学理の概念・原理に基づき、新たな機能を発現する材料の創生を可能とする、材料科学のパラダイムシフトを期待する。

【回答】中間評価のヒアリング時にも指摘があったため、この所見については大変重要視しており、多くのメンバーと議論を集中的に進めた。「超秩序構造」、「Order/Disorder」のトポロジー表現について、リング分布やパーシステントホモロジーを駆使して、超秩序構造体系図(図10)を作成した。図10(a)では結晶からガラスまでのOrder/Disorderに関する指標が得られている。特に、高温圧縮SiO₂ガラスにおける秩序化の発達が明らかに数字として現れている。ガラスの透過率の指標としても有用性が期待できる。縦軸にリングのひずみ具合をとると(図10(b))、結晶であるCoesiteがSiO₂ガラスと同じ領域に位置することが分かる。これは中性子非弾性散乱で見られる両者の類似したボゾンピークと対応付けることができる。また、MFIが比較的ガラスの近くに位置することは、本系がアモルファス化しやすいことを良く説明し、ガラスと同様ボゾンピークが現れる可能性がある。

「留意事項」

「超秩序構造」の学理構築のため、対象とする有機・無機材料中にある多種多様な「超秩序構造」を共通に理解する普遍的な概念と、構造創生・機能設計の議論のフレームワークを明確化することが望まれる。

【回答】上記の超秩序構造体系図により、有機・無機材料を同じ土俵で理解できると考えている。有機材料については、リングによる記述が適している環状分子からなる系のトポロジー解析を進めており、特に分子間相関の違いによってパーシステンス図に大きな変化が現れることが分かった。これが機能性と関係している可能性があり、現在、解析対象を拡大し、更なる検討を進めている。

「参考意見」

材料ライブラリーの整備と公開を積極的に進めるべきとの意見があった。

【回答】ライブラリーについては既に公開しており、永続的に利用することを目的として物質・材料研究機構のサーバーへの移行も進めている。現在、230の物質について登録が完了している。

多種多様な物質系と、「ドーパント」「空隙」「界面」などの超構造生成の起源との関係を明確にすべきとの意見があった。

【回答】図10(a)でドーパント誘起超秩序構造(結晶)は原点付近、空孔・空隙を含む超秩序構造はリングサイズがばらついた領域、結晶/アモルファス境界の超秩序構造は縦軸が0.5から1.0程度の領域をカバーする。様々な物質を同図にプロットすれば3つの超秩序構造の関係を明確にできると考えている。

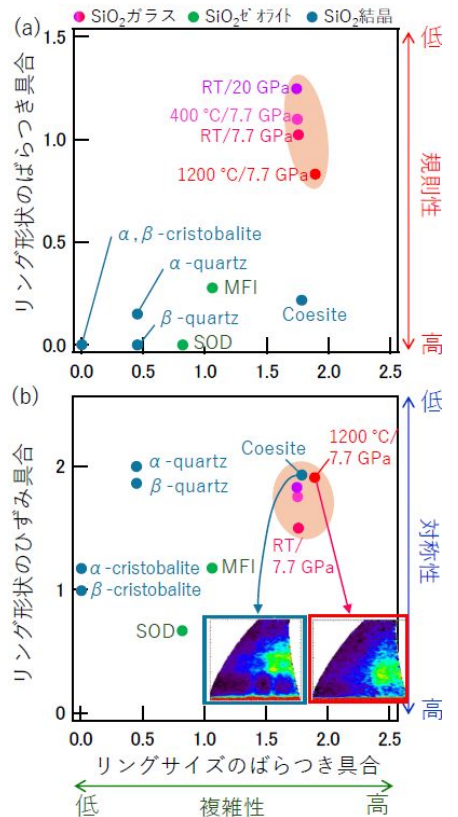


図10 超秩序構造体系図・リング形状の(a)ばらつき具合と(b)歪み具合を縦軸にとった。

11 若手研究者の育成に関する取組実績

研究領域全体を通じ、本研究領域の研究遂行に携わった若手研究者（研究協力者やポスドク、途中で追加・削除した者を含む。）の育成に係る取組の実績について、具体的かつ簡潔に記述すること（1頁以内）。なお、本研究領域が育成に取り組んだ「若手研究者」の定義を冒頭に示すこと。

本研究領域が定める若手とは、学部4年～博士後期課程学生、博士研究員、助教などを主に指す。しかし、ここでは、若手准教授に関わる取り組みも紹介する。

【若手の海外派遣】表1に示すように、本領域では合計14名の若手の海外派遣を行ってきた。1名は長期(2年)、他は短期(2～3ヶ月)である。2021-22年度はCOVID-19のために十分な人数を派遣できなかったが、その分、2023-24年度は多くの若手を送り出した。派遣の後、継続して往来しているケースもあり、新たな海外ネットワーク構築が期待できる。また、「領域報告会」(年2回)や「若手の学校」において優秀なポスター発表を行った合計24名の若手にForest Awardを授与しており、希望の受賞者16名には、表2に記載の領域主催の国際会議で、旅費支給に加えて口頭発表の機会を与えている。

表3 長期及び短期海外派遣若手リス(14名)

年度	名前	滞在先	年度	名前	滞在先
2024	萱野琉輝 (M1 千葉大)	EPFL大学	2022	橋本友次郎 (D1 名大)	アランソン大
	森口晃大(B4 名工大)	アランソン大		中村拓真 (D2 東北大)	アルフレッド大
	魚橋毅也 (D2 名大)	アランソン大		村重博美 (M2 慶應大)	ヘルシホ大
	北原美鈴 (M1 岡山大)	チカガキ大		加藤達也 (PD 名工大)	SIMaP(仏)
	富田広人 (D2 奈良先端)	マイツ大学		手跡雄太 (PD NIMS)	チューリッヒ大
	日色駿介 (M1 東北大)	レナテ-工科大		佐々木俊太 (D2 弘前大)	オルム-大
2023	佐藤柊哉 (D2 東理大)	ダルムシュタット工科大	2021	鈴木藍 (M2 岡山大)	チカガキ大

【若手の学校】2021年と2022年5月に、第1回及び2回「若手の学校」(2日間)をオンラインで開催した。コロナ禍が去った2023年7月と4月に阪大中之島センターにおいて対面開催した。「若手の学校」では、超秩序構造科学に関する4件の基礎講座および3～4件のチュートリアル(演習)に加え、3件の最新トピックスについての講演を行った。特にチュートリアルでは、原子分解能ホログラフィー、X線・中性子散乱データのPDF解析、機械学習、第一原理計算、分子動力学シミュレーションを題材とした演習が行われ、実際の研究に役立ててもらったと考えている。概ね100名程度の参加で領域外からも参加があった。オンライン、対面に関わらずポスター発表も行い、優秀発表者にはForest Awardを授与した。

【若手による国際会議企画】本研究領域では、毎年、海外で国際会議を開催することを戦略の柱の一つとしている。特に、2023、24年度は国際会議を二回行っている。その中で、2023年度はA01-1谷口准教授(当時)と同研究室のStellhorn特任助教(当時)が企画し、HERAEUS財団(ドイツ)に国際会議の開催の申請を行った。無事に採択され、5月22-24日に“Beyond Imperfections: New Structure-Property Relationships in Ceramics and Glasses”をドイツ・Bad Honnefで開催することとなった。また、2024年度には、A02-1木村助教(当時)、小野寺研究員、A01-2北村准教授などの若手が主体となり国際アドバイザーのTse教授と協力し、“International Workshop on Hyperordered Structures and Quantum Materials”をカナダのサスカチュワン大学において7月7-10日の日程で開催した。

【若手向けの講習会】「若手の学校」以外の講習会として、2021年9月13～17日「ガラス構造解析のオンラインチュートリアル」(英語)をA02-1小原が主体で企画しオンラインで開催した。また、SPring-8夏(秋)の学校において、2021-24年の間にA03-2松下が講師として、「ドーパント原子配列解析」の実習を行った。また、A03-1の森川が第一原理電子状態計算手法についての講習・実習を行うCMDワークショップを期間中に10回開催し、合計599名の参加があった。

【若手研究者の受賞・昇進状況】計画班代表者に関しては6人中5人、分担研究者については23人中10人、公募研究班については39名中6名が期間中に昇進を果たした。博士後期課程学生については、27人が修了し、多くがアカデミアに就職している。表彰については、領域全体で53件に上る。

12 アウトリーチ活動に係る取組実績

研究領域全体を通じ、一般向けのアウトリーチ活動に係る取組実績について、具体的かつ簡潔に記述すること(1頁以内)。

「超秩序構造科学」がこれまでに行った、一般向けアウトリーチ活動として、「学会におけるシンポジウムやブース展示」、「動画作成」、「プレスリリース」、「サイエンスショー」、「ニュースレター」などが挙げられる。

【シンポジウム】領域外の研究者に成果を公開するために、表4に示すように、多くのシンポジウムを企画しアウトリーチ活動に務めてきた。2022年秋以降は、COVID-19による制限が徐々に解除され、対面開催できるようになり、より効果的に行えるようになった。これらとは別に、年二回の日本物理学会において、「超秩序構造科学」のセッションを設け成果発信を定期的に行っている。なお、2022年12月の国際ガラス年のクローリング国際会議、及び2023年8月の複雑系に関する国際会議(9IDMRCS)にブースを出展し、3Dプリンターで作成した「超秩序構造」の原子配列や単結晶など成果物の紹介を行った。

表4 これまでに行ったシンポジウム・ワークショップ(海外で行ったものは表2に記載)

'24/9/24	日本物理学会(北大)	超秩序構造が拓く材料科学 "Disorder in Order"と"Order within Disorder"の物理
'24/9/10-13	セラミックス協会(名大)	超秩序構造科学が創造する物性科学
'23/9/6-8	セラミックス協会(京都工芸)	超秩序構造科学が創造する物性科学
'23/3/16	応用物理学会(上智大)	物質の超秩序構造とその応用 ~結晶と非晶質のはざまの科学~
'22/9/14-16	セラミックス協会(徳島大)	国際ガラス記念シンポジウム2:ガラスの科学
'21/9/1-2	セラミックス協会(online)	ナノスケール原子相関・実験・理論・データ科学による無秩序に潜む秩序の抽出・
'21/3/13	日本物理学会(online)	多様な物質に潜む「超秩序構造」~構造物性研究の新展開~

【プロモーションビデオ作成】本研究領域がスタートされたと同時に、COVID-19が社会問題として顕在化し、領域開始直後に動画の作成を進め、youtubeでの公開を行い、公募研究の募集説明などに用いた。このため、公募研究の応募が第一期では117件、第二期では126件と多くの応募があり、一定の成果が得られたと考えている。また、英語版もアップし、海外への宣伝に利用した。なお、JPSJ特集号の内容を元にしたショートムービー(全編英語)も2023年春にyoutubeにおいて公開した。優しい表現を用いており、学生への波及も期待できる。

【プレスリリース・新聞発表】インパクトのある成果については、積極的にプレスリリースを行っており、現在までに82件の発表を行った。また、それに基づく新聞発表・報道が36件あった。中でも、最終年度(2024年度)におけるSPring-8との共同プレスは多く、合計7件となっている。これはSPring-8全体(54件)の13%であり、放射光分野に大きなインパクトを与えた証左と考えている。

【出張授業・サイエンスショー】出張授業などは、領域全体で30件行っている。コロナ禍で期間の前半には行えなかったが、2023年7月22,23日は姫路科学館で、多くの来館客がいる中、光散乱の楽しさを伝えるサイエンスショーを行った。また、領域代表者 林とA01分担研究者 久保園教授の母校である鹿児島中央高校において、2024年11月1日にSSH(Super Science High School)科学講演会を行った。全学年804名の生徒が参加した盛会となった。また、講演会後も特別に教室を準備してもらい、個別に研究者を目指す生徒の質問を受けつけた。

【ニュースレター】年に定期的に2回のニュースレターの発行を行い、領域内外の研究者や学生に成果発信や活動内容の紹介を行っている。既にVol.8までの発行を行っており、次号のVol.9が最終号となる。

【その他活動】2022年は国際ガラス年であることもあり、これに因んで、文科省「一家に一枚 ガラス」が作成されたが、A02分担研究者 小野が文科省の企画・作成に大きく関わった。

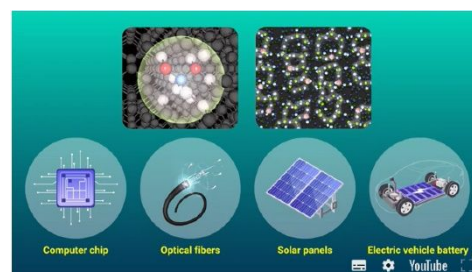


図11 JPSJ特集号を元にしたムービー



図12 鹿児島中央高校における講演会

13 研究費の使用状況

研究領域全体を通じ、研究費の使用状況や効果的使用の工夫、設備等（本研究領域内で共用する設備・装置の購入・開発・運用、実験資料・資材の提供など）の活用状況について、総括班研究課題の活動状況と併せて具体的かつ簡潔に記述すること（2頁以内）。また、領域設定期間最終年度の繰越しが承認された計画研究（総括班を含む。）がある場合は、その内容を記述すること。

1. 整備した装置

A02 班では共通基盤装置を SPring-8 において整備した。蛍光 X 線ホログラフィー/X 線異常散乱(XFH/AXS)複合計測装置(図 13(左))は、結晶とアモルファスの元素選択的な構造解析を一つの装置で可能とした世界初の計測システムである。三連装検出器によるハイスループット AXS 測定や Chi サークル導入による複雑結晶の XFH 計測など新たな技術開発が進んだ。図 13(右)に示す硬 X 線光電子ホログラフィー装置では平行化静電レンズ新たに採用し、高い阻止電圧と高いエネルギー分解($E/\Delta E > 10,000$)を両立できた。2024 年度には、初めて硬 X 線領域の光電子ホログラムを得ることに成功した。バルク領域の計測が可能となるだけでなく、表面酸化しやすい試料など対象となる材料群が格段に広がった。

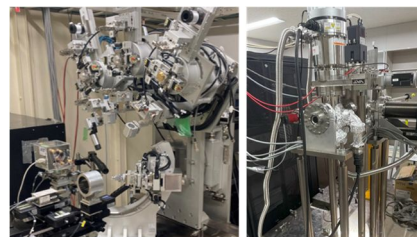


図 13 SPring-8 において整備した共通基盤装置。(左)XFH/AXS 複合計測装置。(右)硬 X 線光電子ホログラフィー装置。

表 5 には上述の共通基盤装置の主要な構成部品とともに、A01、A03 班で整備した装置をまとめて示した。A01 班では、添加元素を含む新規誘電体材料、2000 を超える高融点酸化物、高純度タンパク結晶など、A02 班における構造解析で必要となる単結晶の育成装置を購入した。さらに、ゼオライトやガラスの高密度化による超秩序構造制御のために温度・圧力・昇温速度を広い範囲で調整できる焼結装置、電極材料のデバイス特性評価のために電池セルの組み上げが可能な広い作業スペースを有するグローブボックスを購入した。A03 班では、ガラス、添加元素を含む結晶、タンパク質など大規模な計算を必要とする対象を取り扱うための計算速度の高速化に予算を執行した。専用の GPU サーバの導入により計算速度が 20 倍以上に向上するなど、超秩序構造の機能解明のための計算環境を整備することができた。

表 5 本領域において整備した装置

班	年度	物品名	価格(円)	用途・特徴
A01	2021	浮遊帯域溶融装置	15,895,000	高品質誘電体単結晶を育成し精密物性・構造評価を実施。添加元素を含む試料の育成条件の詳細検討に必要である。
	2021	放電プラズマ焼結装置	8,767,000	温度・圧力・昇温速度範囲が広く、これまで困難だったゼオライトの緻密化や透明バルクリガラスの合成を実施できた。
	2021	グローブボックス	7,635,056	ライブラリに登録した電池材料の性能評価のために不活性環境を保持でき広い作業スペースを有する本装置を導入した。
	2020	液体窒素冷却装置	5,720,000	生体試料の蛍光 X 線ホログラフィーのために、タンパク結晶の高純度精製が必要であるため購入した。
	2020	単結晶引き上げ装置	12,485,000	W 坩堝により高融点(2200)酸化物単結晶を育成できる。酸素雰囲気調整により酸素欠陥制御も可能である。
A02	XFH/AXS 複合計測装置			
	2021	本体(架台・駆動系)	30,085,000	XFH と AXS が一つの装置で実施可能である。
	2021	Chi サークル	5,291,000	XFH 解析用に単結晶方位決定を行うために導入した。
	2021	多連装化装置	6,068,700	検出システムを複数台搭載するために整備した。
	2023	分光結晶用 2 軸ロボット	7,810,000	分光結晶の調整の高速化と高分解能化のため導入した。
	硬 X 線光電子ホログラフィー装置			
2021	本体(チャンバー・レンズ)	6,516,400	高エネルギーの光電子の分光用に静電レンズを搭載した。	
2020	X 線源・RHEED 装置	24,420,000	オンラインでの検証実験と単結晶の状態確認のため導入した。	
2020	真空装置一式	7,645,992	超高真空を保持するために必要となる。	
2023	阻止電圧印加用グリッド	6,047,800	高エネルギーの光電子に対応した高耐電圧の設計を考案した。	
A03	2023	GPU 搭載並列計算機	6,781,500	放射光・電子顕微鏡で得られる大規模計測データの深層学習などのために計算環境の増強を行った。
	2020	生体分子理論計算用サーバ	5,229,400	タンパク質中の超秩序構造の第一原理計算には高速な CPU が必要であり、当時最新の GPU サーバを購入した。
	2020	クラスター環境	5,876,640	ドメイン誘起超秩序構造の計算には膨大な試行錯誤が必要であり、その効率化のために購入した。
	2020	GPU 搭載計算サーバ	7,606,500	GPU の利用により 20 倍以上の計算の高速化を実現し、ガラスなどの大規模な系を取り扱えるようになった。

3. 若手育成と国際展開

本領域では、海外経験を積む機会の提供を重視して、若手育成に取り組んだ。表6に関連する活動の実績を示す。いずれの活動も期間前半はCOVID-19のために制限を受けたが、それでも2021年度には1名、2022年度には2名の海外派遣を実現できた。2022年度にはフランスで国際シンポジウムを開催することができ、4名のフォレスト賞受賞者に現地での講演機会を与えられた。若手の学校はオンライン開催を余儀なくされたが、広く宣伝を行い領域外から多くの若手参加者を呼び込むことができた。しかし、いずれも当初予定していた規模を縮小したため予算の繰越を行い期間後半に本格的な活動を行うこととした。2023、2024年度には海外派遣の人数は大幅に増え、国際シンポジウムは各年二回ずつ海外で開催した。ここではフォレスト賞受賞者の招待に加え、若手の国際シンポジウム参加補助を手厚く行った。若手の学校は現地で開催することができ、特に若手同士の横のつながりを作る良い機会になった。

これらの活動の成果については長期的なスパンで考える必要があるが、現時点でも、上記の活動をきっかけとして、国際共同研究を中心となって進めている学生や若手研究者、更なる短期留学を行う学生、博士後期課程への進学を決めた学生がいるなど、その効果が現れつつある。

表6 若手支援経費のまとめ

年度	若手海外派遣		フォレスト賞副賞		若手国際シンポ参加補助		若手の学校	
	人数	費用	人数	費用	人数	費用	参加人数	費用
2024	6	5,300,000	6	2,300,000	17	4,500,000	62	750,000
2023	5	4,600,000	6	1,600,000	15	3,800,000	76	670,000
2022	2	1,400,000	4	1,100,000	0	0	95	(Online)
2021	1	730,000	0	0	0	0	126	(Online)

4. 人件費

表7には領域で雇用した博士研究員の一覧を示す。多くの若手が現在はアカデミックなポジションを得ており、領域期間中の研究活動が高く評価されたと考えている。本領域による海外派遣や海外での発表を経験した若手も複数名含まれており、有望な若手研究者の育成に寄与できたと自負している。

表7 領域で雇用した博士研究員

氏名	期間(月)	雇用機関	経費(円)	現職
Augustin Lu	36	NIMS	15,000,000	東大・助教
仲吉朝希	36	広島市大	15,000,000	名城大・助教
中島健	13	岡山大	3,000,000	島根大・助教
Jens. R. Stelhorn	12	名大	5,000,000	島根大・講師
手跡雄太	12	NIMS	5,000,000	京大・特定助教
Jan. J. Wiesfeld	12	北大	5,000,000	北大・特任助教
Nirupama Sheet	18	北大	7,500,000	名大・特任助教
Thanh Ngoc Pham	6	阪大	3,000,000	An Giang University, Lecturer
酒井智香子	9	奈良先端大	3,500,000	鳥羽商船高等専門学校・准教授
Halubai Sekhar	33	名工大	11,000,000	熊本大・研究員
加藤 達也	34	名工大	11,300,000	Web サービス
森田秀利	36	東北大	10,700,000	ソフトウェア会社・エンジニア

5. その他、研究推進・アウトリーチのための費用

本領域では、研究推進の鍵となるSPring-8のチームタイム確保のために予算を使用した(2021年度:370万円/9件、2022年度:723万円/15件、2023年度:538万円/16件、2024年度:939万円/31件)。ここでは、総括班会議において波及効果が大いに見込まれる課題を選定し、効果的な運用となるように心掛けた。また、第一期のみ参画していた公募班に関しても、研究期間終了後も継続的にSPring-8での実験費用の補助を行い、成果につながるように努めた。

また、SPring-8における拠点室(研究員を配置)の設置、領域紹介の動画作成、国内シンポジウム開催、出張授業の旅費などに経費を使用し、研究推進及びアウトリーチ活動を活発に実施した。

以上、独自の共通装置開発、特徴的な国際活動と若手育成プログラム、若手のステップアップにつながる人件費使用、研究推進のための大型施設利用補助など、効果的な予算運用ができたと考えている。

14 総括班評価者による評価

研究領域全体を通じ、総括班評価者による評価体制(総括班評価者の氏名や所属等)や本研究領域に対する評価コメントについて、具体的かつ簡潔に記述すること(2頁以内)。評価コメントは、次の点について記述すること。

- (1) 研究領域の設定目的に照らして、研究領域全体で十分な研究成果をあげたか。
- (2) 当該学問分野に新たな変革や転換をもたらしたか。(もたらしつつあるか。)
- (3) その他、特筆すべきポイントや改善すべきポイント

【総括班評価者による評価体制】

学術界からは京都大学福井謙一記念研究センター リサーチディレクターの平尾公彦先生、高輝度光科学研究センター理事長の雨宮慶幸先生、信州大学アクア・リジェネレーション機構 特別荣誉教授(東京大学工学研究科特別教授)の堂免一成先生、また、産業界からは、パナソニック株式会社元参事の山田 昇先生に総括班評価者となって戴いた。年2回の領域報告会や総括班会議の内容に基づく、各評価者の先生方のコメントを以下に記す。

平尾公彦 先生による評価コメント

本研究領域では、「超秩序構造」の観測・理解・制御に関する研究を通じて、新たな材料設計のアプローチを切り拓き、高機能材料の創出を目指してきた。「超秩序構造」とは、「完全な秩序」と「完全な無秩序」の中間に位置する構造状態を指し、機能性ガラス、ゼオライト、超伝導体、生体材料など、多様な材料群を包含する概念である。この極めて挑戦的な研究テーマに対し、領域代表者を中心とする総括班の強力なリーダーシップのもと、領域内の連携・共同研究が活発に推進され、数多くの優れた成果が得られた。特に、合成と測定、実験と理論・計算の連携による分野横断的な研究の進展は特筆に値し、総合的・多角的なアプローチによって複数の有望な研究テーマが新たに創出されている。理論計算分野においては、リアルな物質系を対象とした定量的解析を可能にする電子状態理論や分子動力学法の開発に加え、多様な超秩序相を再現する理論モデルの構築など、先駆的な成果が挙げられた。また、若手研究者の育成にも注力し、「若手の学校」の開催や、海外研究機関への派遣を通じた国際共同研究の推進など、他の研究領域には見られない独自性ある取り組みが実施された。さらに、国際シンポジウムの開催や海外研究グループとの連携強化を通じて、本領域の国際的なプレゼンスも大きく向上している。これらの成果を基盤として、今後は超秩序構造を高度に制御することで、革新的な機能性材料の創出が期待される。異分野の研究者が協力して築いた本領域の研究体制は、今後も継続・発展させるべき貴重な資産である。「超秩序構造科学」は、「学術変革」というプログラムの趣旨を十分に達成したものと高く評価できる。

雨宮慶幸 先生による評価コメント

- (1) 本研究領域が目指したことは、「完全秩序を持つ結晶」と「完全無秩序なアモルファス」に関する研究が従前ほぼ独立に実施されていたため未開拓であった、「完全秩序」と「完全無秩序」との間に存在する中間的な構造領域を開拓すること、その領域を「超秩序構造」と命名し、そのコンセプトを明確にして新たな物性科学を創造すること、である。研究過程で、「超秩序構造」のコンセプトを”Hyperordered Structures in Materials –Disorder in Order and Order within Disorder”と明確に定義することにより、「超秩序構造」のコンセプトが広く共有することが可能になり、このことにより、領域内での議論がしっかりとかみ合い、実質的な連携研究が進み、その成果を広く世界に普及させることに成功した。また、論文発表、学会講演、プレス発表を積極的に行い、十分な研究成果を創出した。
- (2) これまで実在系(不完全秩序、不完全無秩序)材料を扱う構造科学は、理想系(完全秩序、完全無秩序)試料をレファレンスとして、試料・測定・解析の各々において研究が個別的にバラバラに行われてきた。本研究領域は、多くの構造科学研究者が、「超秩序構造」というコンセプトを共有して、互いに連携することが可能になったという点において、当該学問分野に大きなインパクトを与えた。「超秩序構造物性科学の学理構築」に関しては道半ばであるが、今後この学理が深化すれば、当該学問分野に大きな変革・転換をもたらすものと考えられる。

(3) 本領域は、試料班、手法班、理論班からなっていて、その三つの班の連携が実質的かつ良好であり、そのことが多くの成果創出に繋がった。このことは、領域代表者の高いリーダーシップの現れであり、高く評価したい。また、若手研究者の育成を目指した各種の取り組みが活発に行われ、その結果として、多くの若手・中堅研究者が育ったことは高い評価に値する。

堂免一成 先生による評価コメント

本学術変革領域「超秩序構造科学」は、完全結晶とアモルファスの中間にある物質群(不完全結晶、複合欠陥構造、表面欠陥における触媒活性、有機系材料の超秩序構造等)のほとんどを対象とし、そこから何らかの学理の確立を目指すという非常に野心的な目標をもってスタートした。このような広い分野でどの程度の成果が上がるか、当初はやや危ぶむ気持ちもあったが、A01(試料・材料班)、A02(手法班)、A03(理論班)が、早い段階で有機的に機能し数々の原子・分子レベルでの興味深い成果を挙げたことは十分評価できる。これは領域代表者をはじめとする総括班の努力によるところも大きいと考える。特にA02の手法班のもつ知見・技術は当該分野でも世界トップレベルであることは疑いなく、このような技術が多様な材料グループ(計画班だけでなく公募班も含めて)と密接な関係を築け、当初想定していなかったような様々な成果が得られたことは、特筆に値する。また、学理の追及に関しては、当該分野の全ての「超秩序構造」を包含することはあまり意味がないと思われるが、結晶から融体への変化をトポロジーに着目して解析し新しい学理を構築しようとしている点については評価できる。本研究領域においては、特にA02班において世界最高レベルの性能を持ついくつかの装置の構築を行ってきたが、これらの装置が十分にその性能を発揮するのはむしろ今後であろう。したがって、本学術変革領域で築かれた多くの研究者のネットワークだけでなく、さらに広い領域、特に材料分野の研究者との共同研究において、今後益々世界をリードする研究成果を挙げていくことを期待したい。

山田 昇 先生による評価コメント

本研究領域では、際だった材料特性を生み出すミクロな局所的構造(「超秩序構造」)の発見と分析、その理解と体系化、そしてそれをベースとする新材料構築という一連の学問分野創造が位置づけられた。この根源的な取り組みに対して5年という研究期間は決して長くはなかったと思うが、最終的に上記一連した学問分野のそれぞれにおいて優れた成果が報告されている。すなわち、超秩序構造を「見る」手段として複数の解析装置を建設稼働させていること、新規な計算解析手法を開発しその成果を一般公開にまで高めていること、また数種の材料において実際に超秩序構造を設計創製し従来を凌駕する数値を実現していること等は特筆される成果である。結果として多岐にわたる数多くの論文発表、国際会議発表が報告されている。その間、若手研究者の育成活動もよく考慮されていた。

本領域研究の本質であり最大課題は「超秩序構造」をどのように体系化するか、いかにして評価するかということにある。一般に新概念をより統一的で生産的学問体系に仕上げていくには世界を巻き込んだ取り組みが必須になるが、国際学会の企画、共同研究実施開催連携などにも十分な配慮がなされていたと思われる。これまでの進捗として、「超秩序構造」のトポロジーの記述に関し、結合リングのサイズや形状をもとにして結晶からアモルファスまでを統一的に分類・体系化するという着想が得られている。さまざまな研究対象が構造的に分類されれば、その研究開始時のハードルは格段に低くなりスピードアップされると期待できる。もちろん、上記着想が数多くの公募テーマなどを統一して扱えるものになるにはさらなる研究が必要だと思われるが、緒を掴んだということであれば今後の進展が大いに楽しみになる。本研究領域の成果がやがて材料開発の継続的なジャンプを生み出すことを祈念する。研究期間は終了したが、継続した活動をお願いしたい。最後に、この難しいテーマを完遂された領域代表を始め関係者の方々のご努力に敬意を表します。